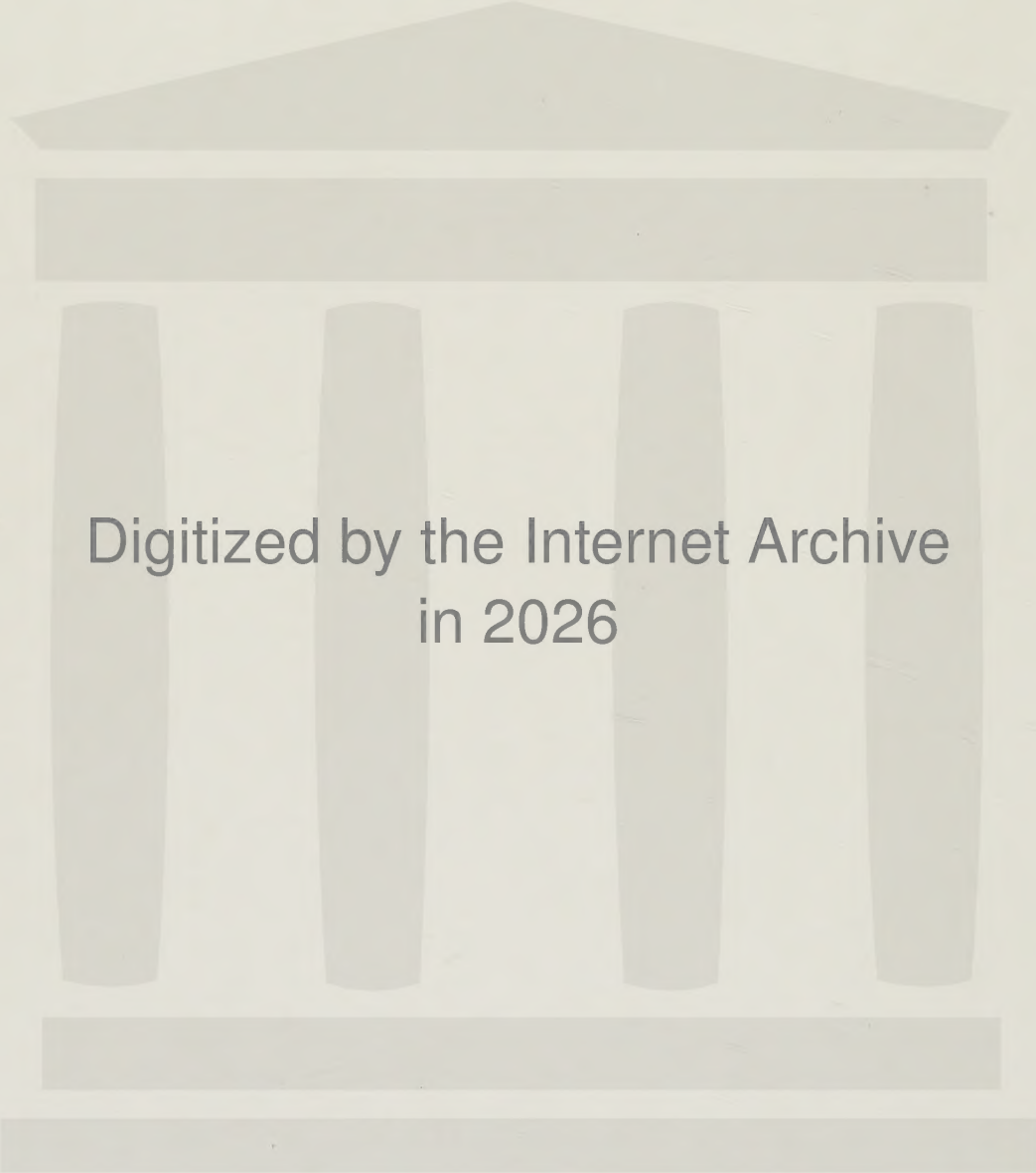


H. Peitz.

Frankfurt a. M. 1981.







Digitized by the Internet Archive  
in 2026

[https://archive.org/details/IA41550820\\_0046](https://archive.org/details/IA41550820_0046)

Theorie der quasimolekularen  
K - Röntgenstrahlung am Beispiel des  
Ni - Ni - Systems

Inaugural - Dissertation  
zur  
Erlangung des Doktorgrades  
der Naturwissenschaften

vorgelegt beim Fachbereich Physik der  
Johann Wolfgang Goethe-Universität

von

Heinrich Peitz

aus Düsseldorf

Frankfurt am Main

1981



Gedruckt mit Genehmigung des Fachbereichs Physik  
der Johann Wolfgang Goethe-Universität zu  
Frankfurt am Main.

|                    |                       |
|--------------------|-----------------------|
| Dekan:             | Prof. Dr. R. Bass     |
| Leiter der Arbeit: | Prof. Dr. W. Greiner  |
| Erstgutachter:     | Prof. Dr. W. Greiner  |
| Zweitgutachter:    | Prof. Dr. R. Dreizler |

Tag der mündlichen Prüfung: 13. Juli 1981



## Abstract

The K - X - ray spectra and anisotropies for the Ni - Ni - system have been calculated for the laboratory energies 30, 60 and 90 MeV. Two - Center - Dirac energies for the three inner shells have been used and the radial, rotational and radiative matrix elements have been calculated. For the radiative matrix elements the long wave-length limit was applied. Coupled channel calculations were used to calculate the ionization amplitudes. It is shown, that within reasonable numerical calculations translation effects can not be incorporated in the radial matrix elements. Therefore radial coupling was neglected. In the calculations shown here, the K - shell was assumed to be empty. The influence of the rotational contribution to spectra and anisotropies has been studied. Comparison with experimental results shows, that the exponential decrease of the spectra is too small for high photon energies. Like in experiment, the calculated anisotropies show a bump close to the  $K_{\alpha}$ - energy of the united system.



## Inhaltsverzeichnis

|       |                                                                   |    |
|-------|-------------------------------------------------------------------|----|
| I     | Einleitung                                                        | 1  |
| II.1  | Theorie der quasimolekularen<br>Röntgenstrahlung                  | 7  |
| II.2  | Die verwendeten Koordinatensysteme                                | 13 |
| II.3  | Die Strahlung im Grenzfall langer<br>Wellenlängen                 | 16 |
| III.1 | Die quasistationären Zweizentren -<br>Lösungen der Diracgleichung | 19 |
| III.2 | Niveaufkreuzungen und Phasensprünge                               | 23 |
| III.3 | Nomenklatur der adiabatischen Zustände                            | 27 |
| IV    | Die gekoppelten Kanalgleichungen                                  | 29 |
| V.1   | Radiale Matrixelemente                                            | 32 |
| V.2   | Rotationsmatrixelemente                                           | 35 |
| V.3   | Strahlungsmatrixelemente                                          | 38 |
| VI.1  | Ionisation                                                        | 43 |
| VI.2  | Reine Strahlungsspektren                                          | 46 |
| VI.3  | Beiträge einzelner Zustände                                       | 50 |
| VI.4  | Stoßparameterabhängigkeit der differ-<br>entiellen Querschnitte   | 54 |
| VII   | Wirkungsquerschnitte und Anisotropien                             | 60 |
| VIII  | Zusammenfassung und Ausblick                                      | 67 |
|       | Literaturverzeichnis                                              | 69 |
|       | Figurenverzeichnis                                                | 72 |

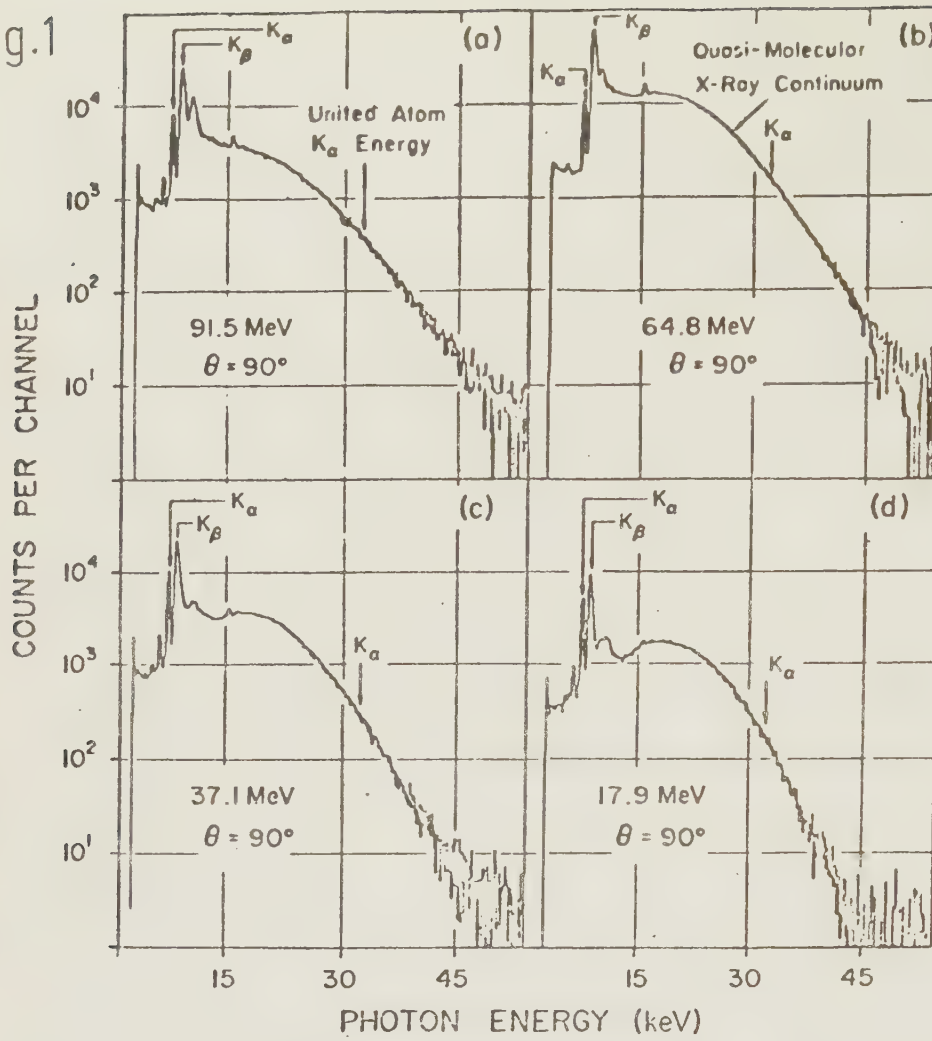


## I. Einleitung

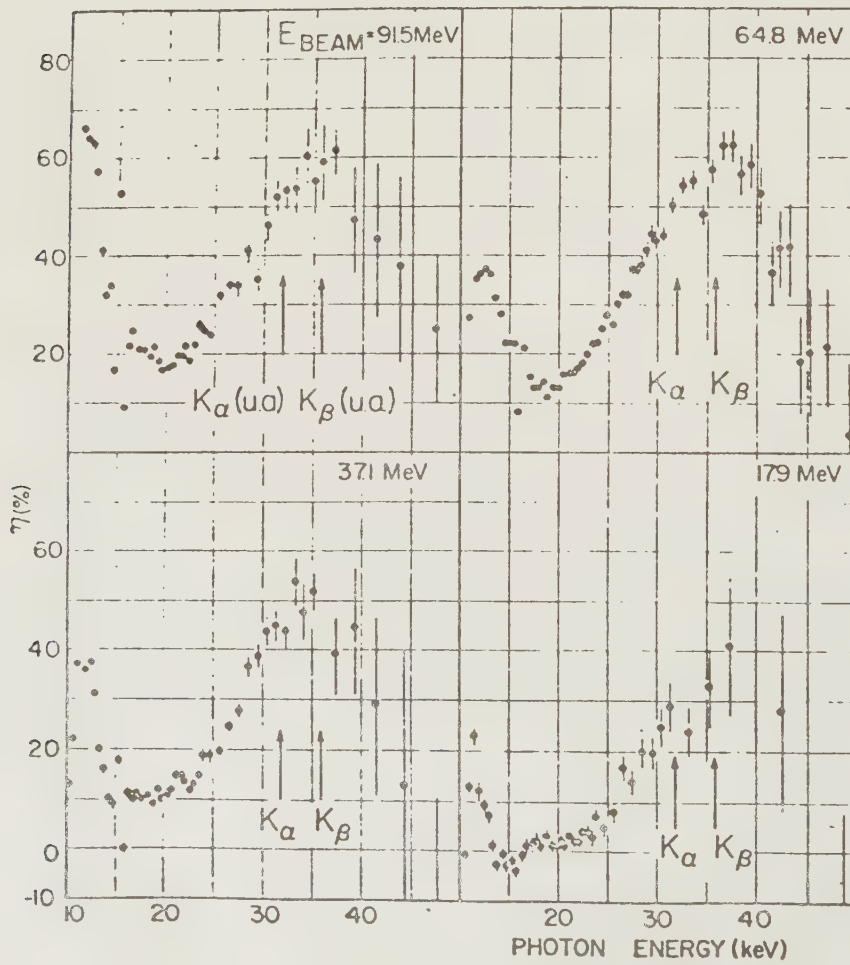
Die Motivation für das Studium der quasimolekularen K - Röntgenstrahlung (K - MO - Strahlung) ist die Erweiterung der Quantenelektrodynamik (QED) auf Systeme mit großen Ladungszahlen. Diese Möglichkeit ergibt sich bei der Bildung von Quasimolekülen in Schwerionenstößen, wobei es zur Bildung molekularer Orbitale ("MO") kommt. Auf die Möglichkeit der Existenz superschwerer Quasimoleküle hat zuerst W. Greiner während der GSI - Seminare 1969 hingewiesen <sup>(1)</sup>. Ein Nachweis für die Bildung molekularer Orbitale während des Stoßes ist die - je nach Stoßsystem - überwiegende K -, L - oder M - Strahlung <sup>(2-5)</sup>. Das Ziel ist, aus den gemessenen Photonenspektren Informationen über die Elektronen - Bindungsenergien, die für schwere Systeme die Größe der Elektronen - Ruhemasse erreichen können, zu gewinnen. Typische Röntgenspektren für das Ni - Ni - System bei verschiedenen Laborenergien zeigt die Figur 1 a <sup>(6,7)</sup>.

Wie man sieht, zeigt die quasimolekulare Röntgenstrahlung einen exponentiellen Abfall bei höheren Photonenenergien, aber keine charakteristische Struktur bei den  $K_{\alpha}$  - und  $K_{\beta}$  - Energien des vereinten Systems (united atom). Eine Größe, die dagegen ein charakteristisches Verhalten zeigt, ist die Anisotropie <sup>(7-9)</sup>, die durch

Fig.1



a)



b)

$$\eta(E_x) = \frac{d\sigma(\vartheta = 90^\circ)}{d\sigma(\vartheta = 0^\circ)} - 1$$

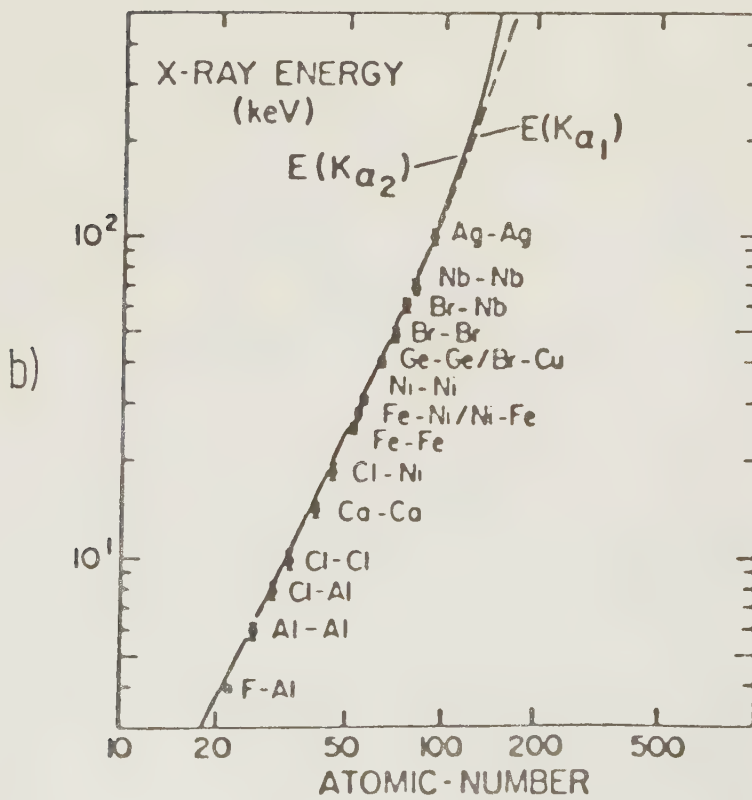
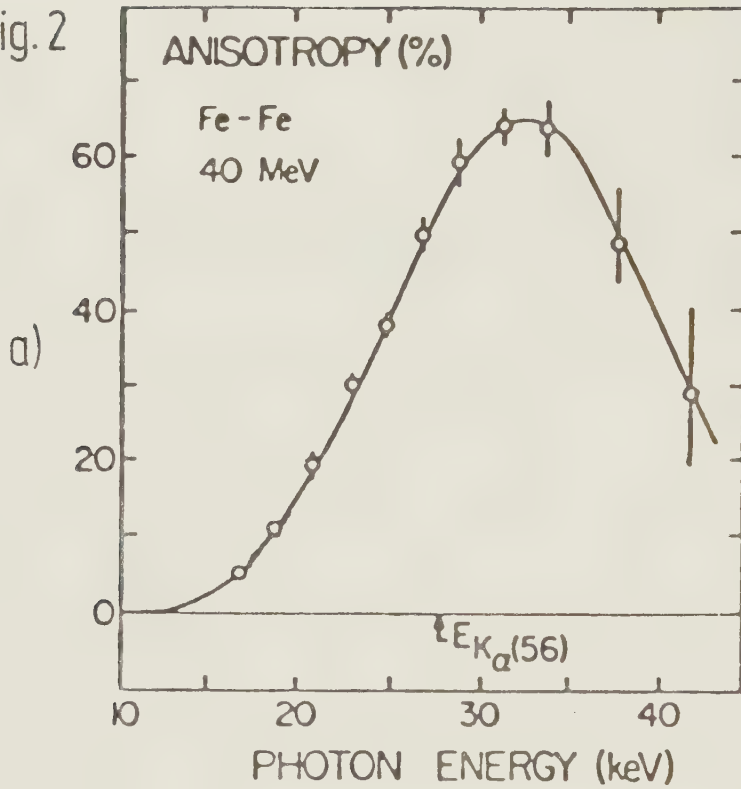
definiert ist, wobei  $\vartheta$  der Winkel zwischen der Achse des Ionenstrahls und der Nachweisrichtung ist. Systematische experimentelle Untersuchungen durch Wölflü und seine Mitarbeiter <sup>(10)</sup> haben gezeigt, daß  $\eta$  ein Maximum in der Nähe der Bindungsenergie des vereinigten Systems hat (Fig. 2 a). Das Maximum der Anisotropie zeigt ein typisches  $Z^2$  - Skalierungsverhalten (Fig. 2 b) für nichtrelativistische Systeme, wie man es von der Schrödinger-gleichung erwartet.

Aufgabe einer Theorie der quasimolekularen Röntgenstrahlung muß es also sein, zum einen den exponentiellen Abfall der Photonenspektren zu reproduzieren, und außerdem das charakteristische Verhalten der Anisotropie wiederzugeben. Die vorliegende Arbeit beschränkt sich auf das symmetrische Ni - Ni - System und beschäftigt sich nur mit der K - Strahlung.

Figur 1:

Molekulare Röntgenspektren (a) und Anisotropien (b) für das Ni - Ni - System für vier verschiedene Laborenergien, wie sie von Greenberg und Mitarbeitern <sup>(6,7)</sup> gemessen wurden.

Fig. 2



Zuerst wird kurz die Theorie der quasimolekularen Röntgenstrahlung behandelt, wobei einige fundamentale Annahmen gemacht werden. So werden

- a) die semiklassische Approximation
  - b) die adiabatische Basis
  - c) die unabhängige Teilchen - Näherung
- und
- d) der Grenzfall langer Wellenlängen
- verwendet.

Notwendige Voraussetzung für die Lösung der gekoppelten Kanalgleichungen sind die Zweizentren-Lösungen. Für die K -, L - und M - Schale werden die radialen -, Rotations - und Strahlungsmatrixelemente zum  $1\Sigma_g$  - Niveau betrachtet. Der Versuch, die Translation zu berücksichtigen, um korrekte radiale Matrixelemente zu gewinnen zeigt, daß zur Berechnung der Ionisation eine wesentliche Erweiterung der Rechnungen vorgenommen werden müßte. Die weiteren Ergebnisse wurden daher gewonnen, in

Figur 2:

(a) Die Anisotropie für das Fe - Fe - System bei  $E = 40$  MeV. Der Pfeil markiert die  $K_{\alpha}$  - Energie

des vereinigten Systems. (b)  $Z^2$  - Skalierungsverhalten nach Messungen von Wölflü und Mitarbeitern.

(10)

dem entweder nur die Strahlung bei vorgegebenen konstanten Amplituden oder Strahlung und Rotationskopplung ohne radiale Kopplung berücksichtigt wurde. Nach Untersuchungen über die Beiträge einzelner Niveaus und die Stoßparameterabhängigkeit der differentiellen Querschnitte, werden die berechneten Wirkungsquerschnitte und Anisotropien gezeigt und mit den experimentellen Ergebnissen verglichen. Im Ausblick werden dann Verbesserungsmöglichkeiten diskutiert.

## II.1 Theorie der quasimolekularen Röntgenstrahlung

Um die Anregungs- und Strahlungsprozesse zu berechnen, wird ein quantenfeldtheoretischer Ansatz verwendet (11). Zur Vereinfachung werden einige wesentliche Annahmen gemacht. So sollen sich die Kerne auf klassischen Bahnen, d.h. Coulomb - Trajektorien, bewegen, was wegen des großen Wertes des Sommerfeldparameters,  $\eta \sim 120 \gg 1$ , gerechtfertigt ist. Ferner wird die Elektron - Elektron - Wechselwirkung vernachlässigt. Dadurch wird die Abschirmung des nuklearen Coulomb - Potentials und die damit verbundene Änderung der Energien nicht berücksichtigt. Außerdem wird das vom Schwerionenstrom induzierte Vektorpotential, das die Entartung der Spinunterzustände aufhebt, vernachlässigt. Für Messungen der Polarisierung der Strahlung müßte man diesen Effekt in den Berechnungen mit einschließen.

Mit diesen Annahmen erhält man folgende Gleichungen für die Wechselwirkung der Elektronen mit dem Strahlungsfeld  $\hat{A}_\mu$  (alle Fock - Operatoren werden durch ein  $\wedge$  gekennzeichnet):

$$(i \gamma^\mu \partial_\mu - m + \gamma^0 V_{TC}) \psi_n = 0 \quad (2.1)$$

$$\hat{\phi} = \sum_n \hat{a}_n \psi_n \quad (2.2)$$

$$\square \hat{A}_\mu = \hat{j}_\mu = -\frac{e}{2} [\bar{\hat{\phi}}, \gamma_\mu \hat{\phi}] \quad (2.3)$$

$$(\hbar = c = 1, \gamma_0 = \beta, \vec{\gamma} = \beta \alpha, (\gamma_0)^2 = 1)$$

Der Operator  $\hat{\phi}$  des Feldes der Elektronen in Gleichung (2.2) wird nach den Lösungen  $\psi_n$  der zeitabhängigen Zweizentren - Diracgleichung entwickelt. Die Operatoren  $\hat{a}_n^+$  und  $\hat{a}_n$  sind Erzeugungs - bzw. Vernichtungsoperatoren der Elektronen in den dynamischen Zuständen  $\psi_n$  und erfüllen die Antikommutatorrelation

$$\{\hat{a}_n^+, \hat{a}_m\} = \delta_{nm} \quad (2.4)$$

Wegen der oben erwähnten Vernachlässigung der Elektron - Elektron - Wechselwirkung sind die  $\hat{a}_n$  zeitunabhängig.

Unter der Voraussetzung, daß die Wechselwirkung adiabatisch an - und ausgeschaltet wird, ist  $\hat{A}_\mu$  asymptotisch frei:

$$\lim_{t \rightarrow \mp \infty} \hat{A}_\mu(x) = \lim_{t \rightarrow \mp \infty} \hat{A}_\mu^{(\pm)}(x) \quad (2.5)$$

+ und - bezeichnen den einlaufenden ("in") bzw. auslaufenden ("out") Anteil.  $\hat{A}_\mu^{(\pm)}$  erfüllt die freien Maxwell - Gleichungen und kann in der üblichen Weise quantisiert werden (12):

$$\hat{A}_\mu^{(\pm)}(x) = \sum_{\vec{k}, \lambda} \left[ \hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(\pm)} q_{\vec{k}\lambda\mu}(x) + \hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(\pm)*} q_{\vec{k}\lambda\mu}^*(x) \right] \quad (2.6)$$

wobei die Erzeugungs - und Vernichtungsoperatoren der Photonen  $\hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(\pm)*}$ ,  $\hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(\pm)}$  die Kommutationsbeziehung

$$\left[ \hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(+)} , \hat{d}_{\vec{k}'\lambda'}^{(+)} \right] = \delta_{\vec{k}\vec{k}'} \delta_{\lambda\lambda'} \quad (2.7)$$

erfüllen. Die Basisvektoren des Photonenfeldes  $q_{\vec{k}\lambda\mu}$  sind ebene Wellen

$$q_{\vec{k}\lambda\mu}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(V \cdot 2 \omega)^{1/2}} \epsilon_{\vec{k}\lambda\mu} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} \quad (2.8)$$

wobei  $V$  das Normierungsvolumen,  $\lambda$  die Polarisierung,  $\vec{k}$  der Wellenvektor des Photons und  $\omega = |\vec{k}|$  ist. Die "in" - Operatoren  $\hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(+)}$  und die "out" - Operatoren  $\hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(-)}$  sind miteinander durch die Beziehung

$$\hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(-)} = \hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(+)} - i \hat{h}_{\vec{k}\lambda} \quad (2.9)$$

verknüpft, wobei

$$\hat{h}_{\vec{k}\lambda} = \sum_{n,m} H_{\vec{k}\lambda}^{nm} \hat{a}_n + \hat{a}_m - \frac{1}{2} \sum_n H_{\vec{k}\lambda}^{nm} \quad (2.10)$$

ist.  $H_{\vec{k}\lambda}^{nm}$  steht für das fouriertransformierte Strahlungsmatrixelement

$$H_{\vec{k}\lambda}^{nm} = - \frac{e}{(V \cdot 2 \omega)^{1/2}} \int dt e^{i\omega t} \langle \psi_n | \vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda} e^{-i\vec{k}\mathbf{x}} \vec{\delta} | \psi_m \rangle \quad (2.11)$$

Zur Ableitung von Gleichung (2.9) wird  $\hat{A}_\mu$  als Lösung von Gleichung (2.3) auf zwei verschiedene Arten dargestellt:

$$\begin{aligned}\hat{A}_\mu(x) &= \hat{A}_\mu^{(+)}(x) + \int d^4y D^{\text{Ret}}(x-y) \hat{j}_\mu(y) \\ &= \hat{A}_\mu^{(-)}(x) + \int d^4y D^{\text{Adv}}(x-y) \hat{j}_\mu(y)\end{aligned}\quad (2.12)$$

Unter Benutzung der Entwicklung des Operators  $\hat{A}_\mu$  (Gleichung 2.6) für freie Felder kann man Gleichung 2.12 auf den Basisvektor  $q_k^\mu \lambda_\mu$  projizieren. Durch algebraische Umformungen unter Berücksichtigung der Eigenschaften der avancierten und retardierten Photonpropagatoren  $D^{\text{Adv}}$  und  $D^{\text{Ret}}$  erhält man dann die Beziehung (2.9). Wie in Referenz 13 gezeigt wurde, kann  $H_{k\lambda}^{\text{nm}}$  nicht als Strahlungsamplitude interpretiert werden.

Im Heisenberg - Bild wird ein System durch einen Zustandsvektor  $|F\rangle$  charakterisiert, der die Randbedingungen enthält. Unter der Annahme, daß sich das System vor dem Stoß im Grundzustand befindet, läßt sich durch

$$\begin{aligned}\hat{a}_n |F\rangle &= 0 & n > F \\ a_n^+ |F\rangle &= 0 & n < F\end{aligned}\quad (2.13)$$

die Fermi - Kante definieren. Außerdem soll als An-

fangsbedingung gelten

$$\hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(+)} | F \rangle = 0 \quad (2.14)$$

d.h., es soll zu Beginn kein freies Photon existieren. Die Gleichungen (2.1) - (2.3) beschreiben zusammen mit den Rand - und Anfangsbedingungen (2.13) (2.13) und (2.14) das System vollständig.

Was gemessen wird und folglich berechnet werden muß, ist die Anzahl der Photonen nach dem Stoß. Die Intensität der Photonen mit Impuls  $\vec{k}$  und der Polarisation  $\lambda$  nach dem Stoß erhält man durch den Erwartungswert des Teilchenzahloperators bezüglich der der "out" - Operatoren

$$I(\vec{k}, \lambda) = \langle F | \hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(-)} + \hat{d}_{\vec{k}\lambda}^{(-)} | F \rangle \quad (2.15)$$

Unter Verwendung der Gleichungen (2.9), (2.10), (2.13) und (2.14) ergibt sich dann aus (2.15) für die Strahlungsintensität

$$I(\vec{k}, \lambda) = \sum_{\substack{n > F \\ m < F}} | H_{\vec{k}\lambda}^{nm} |^2 + \left| \sum_k \tilde{\sum} H_{\vec{k}\lambda}^{nn} \right|^2 \quad (2.16)$$

wobei die Tilde - Summe eine Abkürzung für

$$\tilde{\sum} \equiv \frac{1}{2} \left( \sum_{m < F} - \sum_{n > F} \right) \quad (2.17)$$

ist. Aus der Strahlungsintensität kann man dann den differentiellen Wirkungsquerschnitt der

Strahlung durch

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_N} = \left( \frac{d\sigma}{d\Omega_N} \right)_{\text{Ruth}} \sum_{\lambda} I(\vec{k}, \lambda) \frac{V \omega^2 d\omega d\Omega_k}{(2\pi)^3} \quad (2.18)$$

berechnen. Dabei ist  $\Omega_N$  der Streuwinkel der Kerne und  $\Omega_k$  der Winkel, unter dem das Photon emittiert wird. Die Dichte der Photonenzustände im Energieintervall  $(\omega, \omega + d\omega)$  wird durch den Faktor  $V \omega^2 / (2\pi)^3$  berücksichtigt. Betrachtet man die Gleichungen (2.11) und (2.16), so sieht man, daß die Abhängigkeit vom Normierungsvolumen  $V$  entfällt. Unter Benutzung der Eichbedingung

$$(\partial_\mu \hat{A}^\mu)_{\text{pos}} | F \rangle = 0 \quad (2.19)$$

heben sich die Beiträge der longitudinalen und skalaren Photonen gegenseitig auf, und in Gleichung (2.18) muß daher nur über die transversalen Polarisationen  $\lambda = \pm 1$  summiert werden (Der Index "pos" zeigt an, daß nur die positiven Frequenzen berücksichtigt werden).

## II.2 Die verwendeten Koordinatensysteme

Wenn der azimuthale Photonenwinkel  $\varphi_k$  und die Polarisation  $\lambda$  im Experiment nicht gemessen werden, kann der differentielle Wirkungsquerschnitt als (13)

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\omega d\Omega_k} \right\rangle^{\varphi_k} = \frac{\omega^2}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_k \int_0^{2\pi} d\varphi_N \sum_{\lambda=\pm 1} \int_0^\infty b db I(\vec{k}, \lambda) \quad (2.20)$$

geschrieben werden, wenn man über die  $\varphi_k$  mittelt. Das Photonenspektrum und die Anisotropie sind dann gegeben durch

$$\frac{d\sigma}{d\omega} = 2\pi \int_0^\pi \sin \vartheta_k d\vartheta_k \left\langle \frac{d\sigma}{d\omega d\Omega_k} \right\rangle^{\varphi_k} \quad (2.21)$$

und

$$\eta(\omega) = \frac{\left\langle \frac{d}{d\omega d\Omega_k} \right\rangle^{\varphi_k} \Big|_{\vartheta_k = 90^\circ}}{\left\langle \frac{d}{d\omega d\Omega_k} \right\rangle^{\varphi_k} \Big|_{\vartheta_k = 0^\circ}} - 1 \quad (2.22)$$

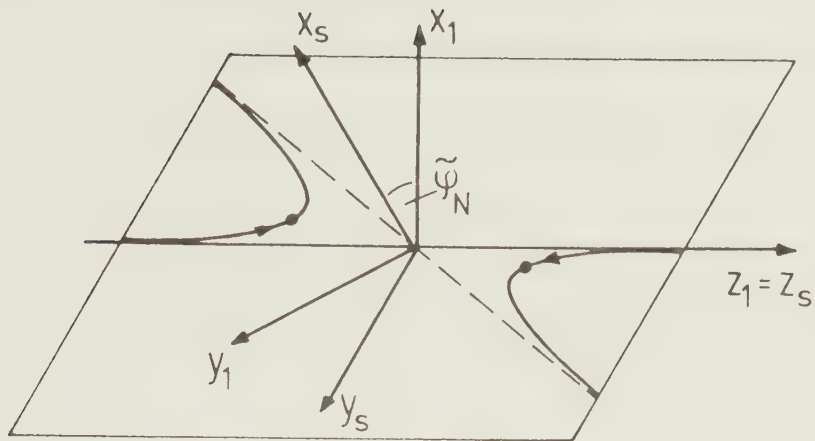
$\varphi_k$  und  $\vartheta_k$  sind die Polarwinkel der Photonen im inertialen Schwerpunktsystem.

Gewöhnlich benutzt man zur Berechnung von (2.20) die Lösungen der Zweizentren - Diracgleichung im intrinsischen Koordinatensystem ( $S_2$ ) der beiden Kerne, in dem die  $z$  - Achse mit der internuklearen Achse zusammenfällt. Die Photonen dagegen werden in dem System ( $S_3$ ), in dem die  $z$  - Achse parallel zum Impulsvektor  $\vec{k}$  des Photons liegt, beschrieben. Da das Spektrum im Experiment im Laborsystem ( $S_1$ ) gemessen wird, hat man drei verschiedene Koordinatensysteme, die in Figur 3 dargestellt sind (14). Die Streuebene ( $y_s, z_s$ ) wird mit dem Winkel  $\tilde{\varphi}_N$  um die  $z_1$ -Achse gedreht. Ein zu  $z_2$  paralleler Vektor hat daher im  $S_1$  - System den Azimuthwinkel  $\varphi_N = \pi/2 + \tilde{\varphi}_N$ .

Figur 3:

Der Zusammenhang der drei verwendeten Koordinatensysteme

- (a)  $S_1$  ist das nichtmitrotierende Schwerpunktsystem. Die  $z_1$  - Achse ist die Strahlachse.
- (b)  $S_2$  ist das mitrotierende Schwerpunktsystem. Die  $z_2$  - Achse liegt in der Verbindungslinie der Kerne.
- (c)  $S_3$  ist das Photonensystem, in dem der Wellenvektor  $\vec{k}$  in Richtung der  $z_3$  - Achse liegt.



UFFm TP 80-031

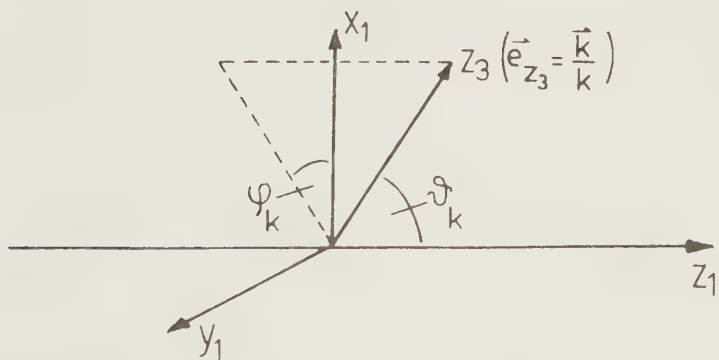
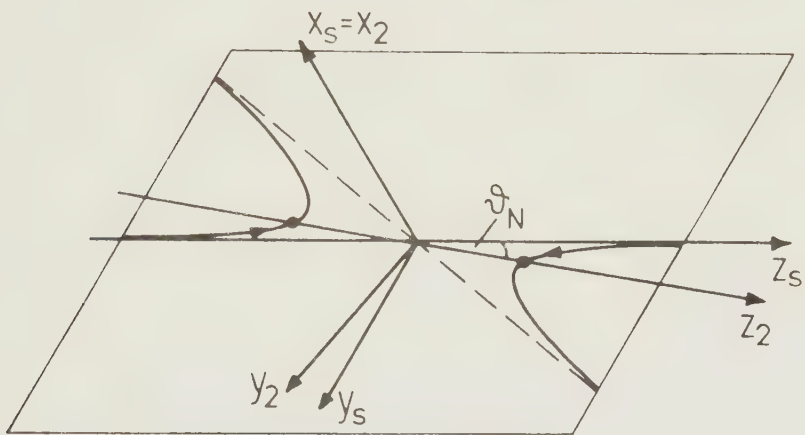


Fig. 3

### II.3 Die Strahlung im Grenzfall langer Wellenlängen

Um die Integrale über  $\varphi_N$  und  $\varphi_K$  und die Summation über  $\lambda$  in (2.20) analytisch ausführen zu können, muß man eine Näherung einführen. Dazu wird in Gleichung (2.11) folgende Vereinfachung vorgenommen

$$\vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}^* \cdot e^{-i\vec{k}\vec{x}} \longrightarrow \vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}^* \quad (2.23)$$

Dies ist der sogenannte Grenzfall langer Wellenlängen, der nur für

$$|\vec{k} \cdot \vec{x}| \ll 1 \quad (2.24)$$

gerechtfertigt ist.

Um die Integrationen und Summationen ausführen zu können, schreiben wir Gleichung (2.11) in der Form

$$H_{\vec{k}\lambda}^{nm} = - \frac{e}{(2\omega)^{1/2}} (\vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}^*)^{S_1} \int dt e^{i\omega t} (\vec{j}^{nm})^{S_1} \quad (2.25)$$

mit

$$\vec{j}^{nm} = \langle \psi_n | \vec{j} | \psi_m \rangle, \quad \vec{j} = -e \vec{y} \quad (2.26)$$

Alle Vektoren der Gleichung (2.25) beziehen sich auf das Laborsystem  $S_1$  und man erhält sie mit Hilfe der üblichen Rotationsmatrizen aus den ur-

sprünglichen Koordinatensystemen. Transformiert man den Strahlungsoperator  $(\vec{y})^{S_2}$  aus dem intrinsischen Koordinatensystem in die Streuebene, so erhält man einen transformierten Operator

$$\vec{\Gamma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \vartheta_N & \sin \vartheta_N \\ 0 & -\sin \vartheta_N & \cos \vartheta_N \end{pmatrix} (\vec{y})^{S_2} \quad (2.27)$$

Nun kann man Terme  $T_i$  definieren durch

$$T_i \equiv \int_0^\infty b \, db \left[ \left| \sum_n \int dt e^{i\omega t} \Gamma_i^{nn} \right|^2 + \sum_{\substack{n>F \\ m<F}} \left| \int dt e^{i\omega t} \Gamma_i^{nm} \right|^2 \right] \quad (2.28)$$

$i = 1, 2, 3$

Mit diesen Abkürzungen läßt sich dann (2.20) als

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\omega \, d\Omega_k} \right\rangle^{\varphi_k} = \quad (2.29)$$

$$\frac{e^2}{\omega \pi} \left[ T_1 + T_2 + \frac{1}{2} \sin^2 \vartheta_k (2T_3 - T_1 - T_2) \right]$$

schreiben. Damit lauten dann die Ausdrücke für das Spektrum und die Anisotropie in der abschlie-

Benden Form

$$\frac{d \sigma}{d \omega} = \frac{e^2}{3 \pi} \sum_{i=1}^3 T_i \quad (2.30)$$

und

$$\eta(\omega) = \frac{T_3}{T_1 + T_2} - \frac{1}{2} \quad (2.31)$$

Es muß noch einmal betont werden, daß (2.29) - (2.31) selbstverständlich nur im Grenzfall langer Wellenlängen gelten. Obwohl die Näherung nicht gut erfüllt ist, wurde sie hier verwendet, weil sie eine immense Vereinfachung der Rechnungen bedeutet. So ist für Ni - Ni bei einer typischen Photonenenergie von 30 keV und  $x = 2000$  fm  $|\vec{k} \cdot \vec{x}| \sim 0.4$  <sup>(15)</sup>. Es ist aber von vornherein zu erwarten, daß die Rechnungen im Vergleich mit dem Experiment noch am ehesten für die K - Strahlung, bei der die Bedingung (2.24) am schwächsten verletzt wird, zufriedenstellend sind.

### III.1 Die quasistationären Zweizentren - Lösungen der Diracgleichung

Zur Berechnung der dynamischen Zustände  $\psi_1$  wird zunächst die stationäre Zweizentren - Diracgleichung

$$\gamma^0 \left[ \vec{\gamma} \cdot \vec{p} + m_e + \gamma^0 V_{TC} \right] \psi_1 = \omega_1 \psi_1 \quad (3.1)$$

gelöst. Dabei ist  $V_{TC}$  das Zweizentren - Coulomb - Potential

$$V_{TC}(\vec{r}, R(t)) = - \frac{z_1 e^2}{\left| \vec{r} - \frac{M_2}{M_1 + M_2} R \vec{e}_z \right|} - \frac{z_2 e^2}{\left| \vec{r} - \frac{M_1}{M_1 + M_2} R \vec{e}_z \right|} \quad (3.2)$$

$V_{TC}$  hängt von dem internuklearen Abstand  $R$  ab, folglich also auch  $\omega_1$  und  $\psi_1$ .

In symmetrischen Systemen stehen zur Charakterisierung einer Zweizentrenlösung nur zwei gute Quantenzahlen zur Verfügung: Parität und die Projektion  $\mu$  des Gesamtdrehimpulses  $\vec{j}$  auf die Verbindungsachse der beiden Kerne. Der Drehimpuls ist in zentralen Potentialen keine Erhaltungsgröße. Darum ist jede Eigenlösung eine Überlagerung von Zuständen mit bestimmten Drehimpuls:

$$\psi_{\mu}^n = \sum_{\kappa} \psi_{\mu\kappa}^n = \sum_{\kappa} \begin{pmatrix} G_{\kappa}^n & \chi_{\kappa}^{\mu} \\ i F_{\kappa}^n & \chi_{-\kappa}^{\mu} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

$\psi_{\mu}^n$  ist ein 4 - komponentiger Bispinor, wobei der Index n die Zustände mit gleichen  $\mu$  ( $\mu = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots$ ) durchnumeriert.  $G_{\kappa}^n$  und  $F_{\kappa}^n$  sind der Radialteil der "großen" bzw. "kleinen" Komponente.  $\chi_{\kappa}^{\mu}$  sind die Spin - Winkelfunktionen<sup>(16)</sup>

$$\chi_{\kappa}^{\mu} = \sum_{m=\pm \frac{1}{2}} C \left( 1 \frac{1}{2} j, \mu-m m \right) Y_{1\mu-m} \chi_m \quad (3.4)$$

mit

$$\chi_m = \begin{cases} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & : m = + \frac{1}{2} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & : m = - \frac{1}{2} \end{cases}$$

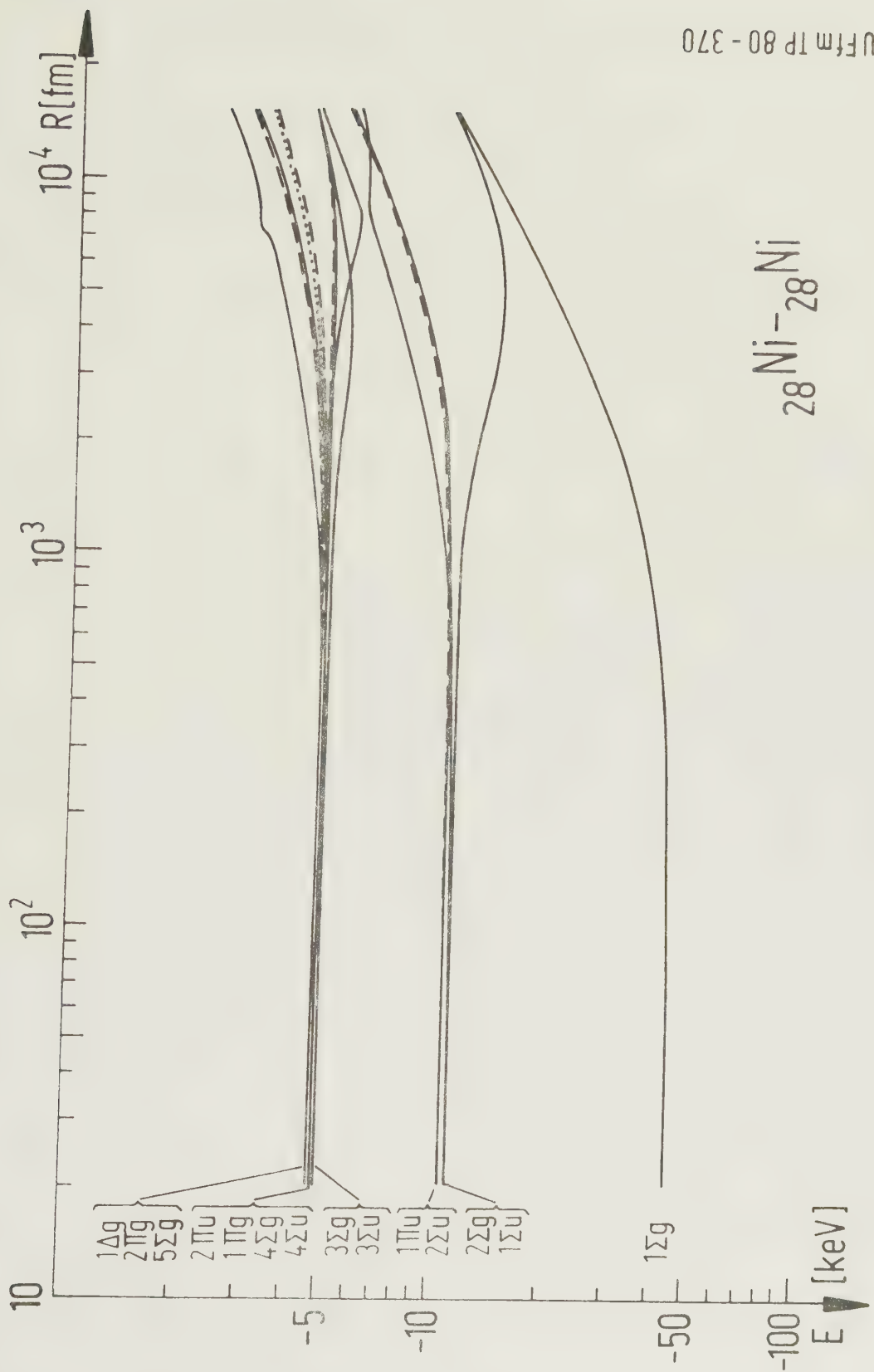
$\kappa$  ist mit dem Bahndrehimpuls  $l$  durch

$$\kappa = \begin{cases} 1 & : j = 1 - \frac{1}{2} \\ -1 - 1 & : j = 1 + \frac{1}{2} \end{cases} \quad (3.5)$$

verknüpft und durchläuft daher den Wertebereich  $\pm 1, \pm 2, \dots$

Figur 4:

Das Ni - Ni - Korrelationsdiagramm der Zweizentren - Diracenergien.



U Ffm TP 80 - 370

$^{28}\text{Ni}-^{28}\text{Ni}$

Fig.4

Setzt man (3.3) in (3.1) ein und projiziert auf die Winkelbasis (3.4), so erhält man die Differentialgleichungen für die radialen Komponenten:

$$\frac{d F_{\kappa}^n}{dr} = \frac{\kappa - 1}{r} F_{\kappa}^n - (E - m) G_{\kappa}^n + \sum_{\kappa'} G_{\kappa}^n \langle \chi_{\kappa}^{\mu} | v_{TC} | \chi_{\kappa'}^{\mu} \rangle \quad (3.6)$$

$$\frac{d G_{\kappa}^n}{dr} = -\frac{\kappa + 1}{r} G_{\kappa}^n + (E + m) F_{\kappa}^n - \sum_{\kappa'} F_{\kappa'}^n \langle \chi_{-\kappa}^{\mu} | v_{TC} | \chi_{-\kappa'}^{\mu} \rangle$$

Die Zweizentren - Diracgleichung löste zuerst B. Müller (17-19). Für das hier gezeigte Zweizentrenendiagramm des Systems Ni - Ni (Figur 4) wurde ein numerisches Integrationsverfahren, das von B. Müller und J. Rafelski entwickelt wurde (20), verwendet.

### III.2 Niveaureuzungen und Phasensprünge

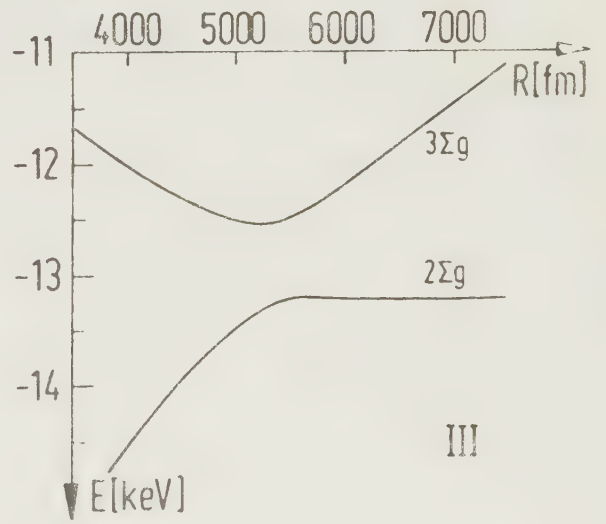
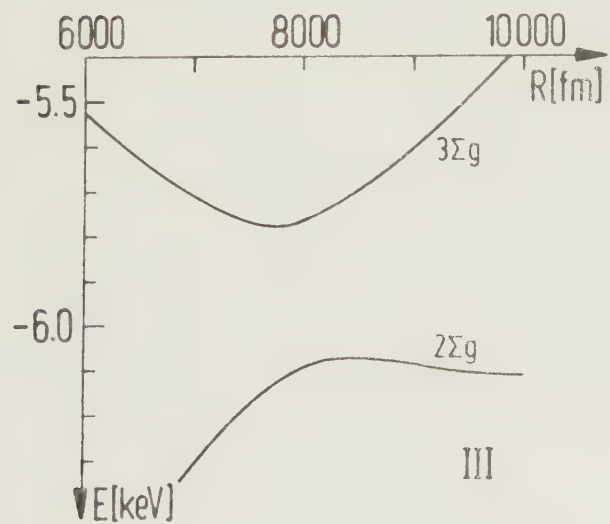
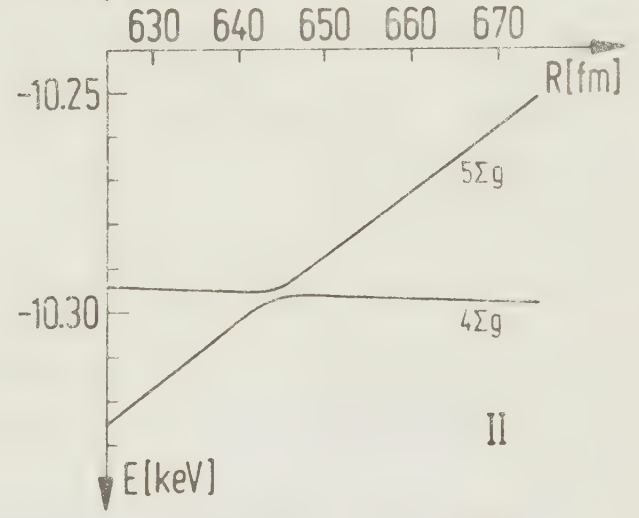
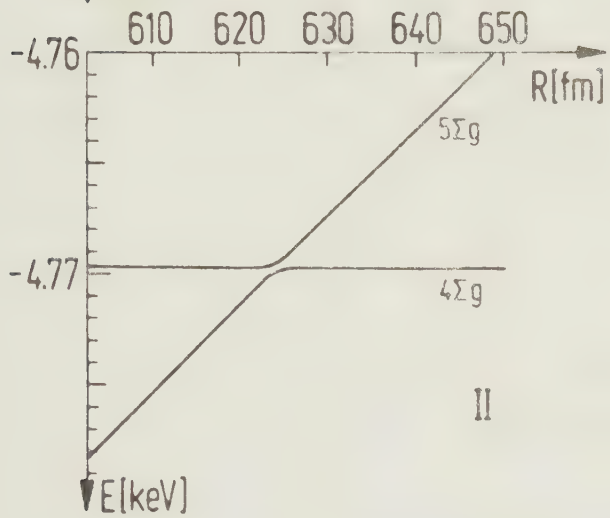
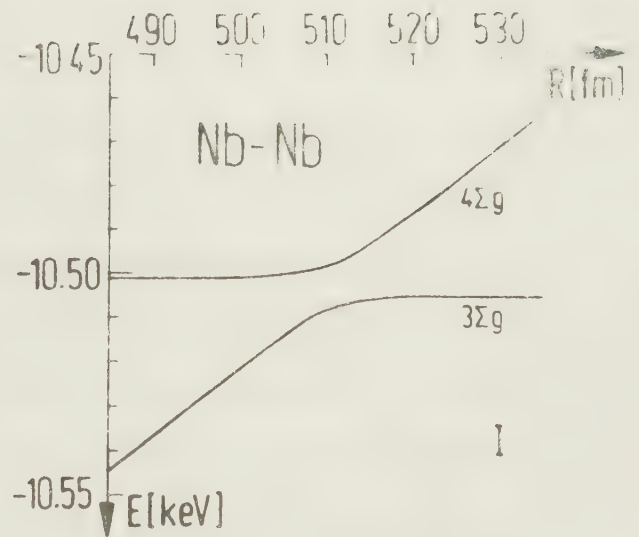
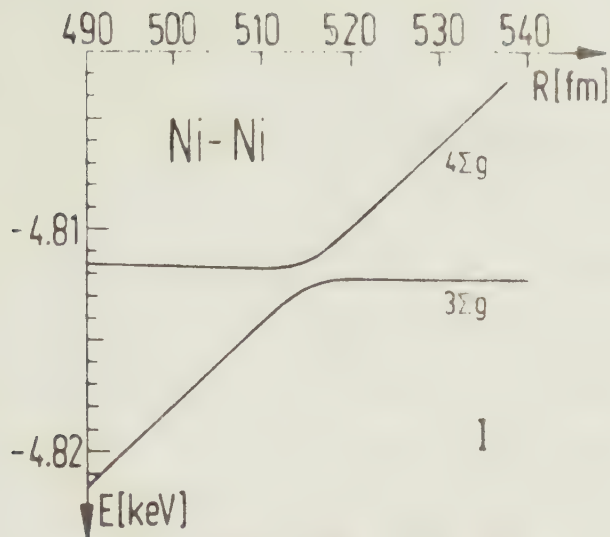
Die zeitliche Änderung des Zweizentrenpotentials während des Stoßes führt zu zeitlichen Änderungen der Bindungsenergien der adiabatischen Elektronenzustände, wodurch es zu Niveaureuzungen kommen kann. Wegen des Pauliprinzipes können sich nur solche diskrete Lösungen des Zweizentren - Diracoperators kreuzen, die sich in mindestens einer "guten" Quantenzahl unterscheiden. Für das hier untersuchte symmetrische System bedeutet dies, daß die Energieniveaus entweder verschiedene Parität oder verschiedene magnetische Quantenzahlen  $\mu$  haben müssen. Ist  $\hat{j}_z$  die Projektion des Gesamtdrehimpulses auf die Verbindungsachse der beiden Kerne, so gilt  $\hat{j}_z \psi_\mu(\vec{r}) = \mu \psi_\mu(\vec{r})$ . In diesem Fall spricht man von einer "erlaubten Kreuzung", bei der sich die Wellenfunktionen und Energien der sich kreuzenden Zustände nicht gegenseitig beeinflussen. Bei "verbotenen Kreuzungen", bei denen die Quantenzahlen der beiden Zustände gleich sind, erfolgt ab einer minimalen Energiedifferenz eine "Richtungsänderung" der Energieniveaus, so daß sie sich nicht schneiden. Die Wellenfunktionen dagegen mischen sich im Kreuzungsbereich. D.h., die stärksten Multipolkomponenten der einen Wellenfunktion werden im Kreuzungsbereich zu den stärksten

Multipolkomponenten der jeweils anderen Wellenfunktion, was zu einer Peakstruktur in den Matrixelementen für diese Zustände im Kreuzungsbereich führt. Die drei für die  $\Sigma$  - Zustände auftretenden verbotenen Kreuzungen im Ni - Ni - System und zum Vergleich die entsprechenden Kreuzungen für das Nb - Nb - System sind in Figur 5 dargestellt.

In der diabatischen und der adiabatischen Notation ist das Verhalten der Zustände bei einer verbotenen Kreuzung verschieden. In der diabatischen Notation folgt ein Zustand  $|\psi\rangle$  bei Änderung des Zentrenabstandes  $R$  so lange der entsprechenden Energiekurve, bis es zu einer verbotenen Kreuzung kommt. Dort wechselt  $|\psi\rangle$  die Energiekurve, d.h. es kommt zu einem Sprung in der Energiefunktion  $E(R)$ . Dagegen folgt das Elektron weiterhin der ursprünglichen Wellenfunktion, die sich nicht ändert. Dies ist eine Folge der Bedingung, daß für die Lösungen der stationären Diracgleichung die Komponenten

Figur 5:

Vergleich der verbotenen Kreuzungen der  $\Sigma$  - Zustände des Ni - Ni - und des Nb - Nb - Systems.



$f_{\mu x}(r)$  und  $g_{\mu x}(r)$  reell sein sollen, und daher  $|\psi\rangle$  eine bestimmte, sich nicht ändernde Phase hat. In der adiabatischen Notation dagegen folgen die Zustände  $|\psi\rangle$  den Energieniveaus auch im Bereich der verbotenen Kreuzungen, so daß keine Energiesprünge auftreten. Dafür ändern sich aber die Wellenfunktionen durch schnelle Änderungen der Phasen. Da der Überlapp der Wellenfunktionen ein Maß für die Phasenänderung ist, kann man durch Berechnung von

$$\frac{1}{2} ( 1 - \langle \psi(R_1) | \psi(R_2) \rangle )$$

$$\approx \begin{cases} 1 & \text{Phasenänderung} \\ 0 & \text{keine Phasenänderung} \end{cases}$$

feststellen, ob sich die Phase von  $|\psi\rangle$  zwischen den Abständen  $R_1$  und  $R_2$  ändert.

### III.3 Nomenklatur der adiabatischen Zustände

Für die Bezeichnungsweise der adiabatischen Energiezustände gibt es zwei Möglichkeiten. Die erste, wie sie u.a. von B. Müller in der Dissertation verwendet wurde, bezeichnet die Niveaus nach den Elektronenzuständen, in die sie für  $R \rightarrow O$  übergehen. Die "atomare Notation" bezieht sich also nur auf das vereinigte System. Die zweite Möglichkeit ("molekulare Notation") ist die Bezeichnung nach aufsteigender Energie, wie sie bei Molekülen mit fixierter Lage der Kerne verwendet wird. Vom tiefsten gebundenen Zustand an werden die Zustände mit den gleichen "guten" Quantenzahlen durchnumeriert und je nach Parität mit dem Index u (ungerade) oder g (gerade) versehen. Im Grenzfall des vereinigten Systems ergibt dann der Vergleich der beiden Bezeichnungsweisen für die drei inneren Schalen bei symmetrischen Systemen folgende Zuordnung:

| molekulare   | atomare                                           |
|--------------|---------------------------------------------------|
| Notation     | Notation (nur im<br>Grenzfall $R \rightarrow 0$ ) |
| 1 $\Sigma_g$ | 1 s $1/2$ $\sigma$                                |
| 1 $\Sigma_u$ | 2 p $1/2$ $\sigma$                                |
| 2 $\Sigma_g$ | 2 s $1/2$ $\sigma$                                |
| 2 $\Sigma_u$ | 2 p $3/2$ $\sigma$                                |
| 3 $\Sigma_u$ | 3 p $1/2$ $\sigma$                                |
| 3 $\Sigma_g$ | 3 s $1/2$ $\sigma$                                |
| 4 $\Sigma_u$ | 3 p $3/2$ $\sigma$                                |
| 4 $\Sigma_g$ | 3 d $3/2$ $\sigma$                                |
| 5 $\Sigma_g$ | 3 d $5/2$ $\sigma$                                |
| 1 $\Pi_u$    | 2 p $3/2$ $\pi$                                   |
| 1 $\Pi_g$    | 3 d $3/2$ $\pi$                                   |
| 2 $\Pi_u$    | 3 p $3/2$ $\pi$                                   |
| 2 $\Pi_g$    | 3 d $5/2$ $\pi$                                   |
| 1 $\Delta_g$ | 3 d $5/2$ $\delta$                                |

$\Sigma$ ,  $\Pi$ ,  $\Delta$  stehen für die Werte  $1/2$ ,  $3/2$ ,  $5/2$   
des Absolutbetrages der Projektion des Gesamtdreh-  
impulses auf die Molekülachse.

#### IV. Die gekoppelten Kanalgleichungen

Setzt man für  $\psi_n$  die Entwicklung nach den stationären Zuständen  $\varphi_1$

$$\psi_n^{(\pm)}(t) = \sum_l b_{nl}^{(\pm)}(t) \varphi_l e^{-i \int_0^t dt' \omega_l} \quad (4.1)$$

in die Zweizentren - Diracgleichung ein

$$(i \gamma^\mu \partial_\mu - m + \gamma^0 V_{TC}) \psi_n = 0 \quad (4.2)$$

ein und projiziert auf die Zustände  $\varphi_n$ , so erhält man ein System gekoppelter Differentialgleichungen für die Einteilchen - Übergangs - Amplituden  $b_{nl}^{(\pm)}$

$$\dot{b}_{nl}^{(\pm)} = - \sum_{l'} b_{nl'}^{(\pm)} e^{i \int_0^t dt' (\omega_l - \omega_{l'})} \langle \varphi_l | \partial_t | \varphi_{l'} \rangle \quad (4.3)$$

Wie bereits erwähnt gibt es zwei verschiedene Randbedingungen:

$$\lim_{t \rightarrow \pm\infty} b_{nl}^{(\pm)}(t) = \delta_{nl} \quad (4.4)$$

und folglich muß zwischen den "in" - und "out" - Operatoren  $\hat{a}_n^{(+)}$ ,  $\hat{a}_n^{(-)}$  unterschieden werden. Der Grundzustand  $|F\rangle$  (s. Gleichung 2.13) wird durch "in" - Operatoren definiert, während die

Ionisationsraten  $P_n$  mit Hilfe der "out" - Operatoren berechnet werden. Aus den gegebenen Definitionen von  $F$  und  $\hat{a}_n^{(-)}$  folgt, daß die Wahrscheinlichkeit in dem Niveau  $n$  ein Loch zu finden, durch

$$\begin{aligned} P_n &= 1 - \langle F | \hat{a}_n^{(-)+} \hat{a}_n^{(-)} | F \rangle \\ &= \sum_{m \geq F} |b_{mn}^{(+)}(\infty)|^2 \end{aligned} \quad (4.5)$$

gegeben ist. Die letzte Beziehung erhält man unter Benutzung von Gleichung (4.1), in der beide Entwicklungen von  $\hat{\phi}$  berechnet wurden (analog zu Gleichung 2.12).

Das Gleichungssystem (4.3) kann durch numerische Integration mit Hilfe einer Prädiktor - Korrektor - Methode gelöst werden. Es reicht wegen der Bedeutung der Vielstufenprozesse in der Anregung nicht aus, nur die zeitabhängige Störungsrechnung erster Ordnung zu benutzen (21).

Die Zeitableitung im Gleichungssystem (4.3) kann in einen radialen und einen Rotationsanteil aufgespalten werden

$$\partial/\partial t = \dot{R} \partial/\partial R - i \vec{\omega}_{\text{Rot}} \cdot \vec{J} \quad (4.6)$$

wobei  $\vec{\omega}_{\text{Rot}}$  die Rotationsfrequenz der internuklearen Achse und  $\vec{J}$  der Drehimpulsoperator des Elektrons ist.

Die radiale Kopplung wirkt nur zwischen Zuständen gleicher magnetischer Quantenzahl ( $\Delta\mu = 0$ ), während die Corioliswechselwirkung  $-i\vec{\omega}_{\text{Rot}} \cdot \vec{J}$  zwischen allen Zuständen bei denen die Differenz der magnetischen Quantenzahlen  $\pm 1$  ist ( $|\Delta\mu| = 1$ ) wirkt. Die verschiedenen Auswahlregeln führen dazu, daß vor allem durch die Rotationskopplung auch bei symmetrischen Systemen viele Kanäle miteinander koppeln.

## V.1 Radiale Matrixelemente

Wenn die Lösung der Zweizentren - Diracgleichung vorliegt, lassen sich die radialen Matrixelemente mit Hilfe des Hellmann - Feynman - Theorems (22)

bestimmen:

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_n | \partial / \partial R | \psi_m \rangle & \\
 &= (E_m - E_n)^{-1} \langle \psi_n | [\partial / \partial R, H_{TC}] | \psi_m \rangle \quad (5.1) \\
 &= (E_m - E_n)^{-1} \langle \psi_n | \partial V_{TC} / \partial R | \psi_m \rangle
 \end{aligned}$$

Dabei sind  $\psi_n$  und  $\psi_m$  die relativistischen Zweizentrenwellenfunktionen und  $V_{TC}$  das Zweizentren-Potential (3.2). Mit

$$|\psi_{i\mu}(\vec{r})\rangle = \sum_{\kappa} \begin{pmatrix} f_{\mu\kappa}(r) \chi_{\kappa}^{\mu} \\ ig_{\mu\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu} \end{pmatrix} \quad (5.2)$$

als Anfangs - und

$$\langle \psi_{f\mu}(\vec{r}) | = \sum_{\kappa} ( F_{\mu\kappa} \chi_{\kappa}^{\mu+}, -iG_{\mu\kappa}(r) \chi_{-\kappa}^{\mu+} ) \quad (5.3)$$

als Endzustand wurden die radialen Matrixelemente dann mit Hilfe eines Gauss - Integrationsverfahrens (23) berechnet. Für  $R \rightarrow \infty$  sollte die radiale Kopplung zwischen den gebundenen Zuständen verschwinden. Dies ist jedoch nicht der Fall. Die Matrixelemente haben einen konstanten Grenzwert, der zu unphysikalischen

Oszillationen in der Amplitude führt<sup>(24)</sup>. Dies liegt daran, daß die molekularen Eigenfunktionen asymptotisch keine Lösungen der Schrödinger - Gleichung sind. Bates führte daher einen sogenannten "Translationsfaktor"

$$T = \exp \left( \pm \frac{1}{2} i m_e \vec{v} \cdot \vec{r} \right) \quad (5.4)$$

ein, wobei  $\vec{v}$  die Relativgeschwindigkeit der beiden Atome ist. Jede separierte atomare Wellenfunktion muß mit  $T$  multipliziert werden, wobei das Vorzeichen des Exponenten davon abhängt, bei welchem Kern die atomare Wellenfunktion lokalisiert ist. Dies Verfahren dämpft aber die Oszillationen nur sehr langsam, d.h. die Rechnungen hätten bis zu sehr großen Zweizentrenabständen durchgeführt werden müssen<sup>(25)</sup>. Ein schneller wirkendes Verfahren wurde in<sup>(26)</sup> vorgeschlagen, indem die asymptotischen Kopplungen durch einen einen exponentiellen Faktor der Form

$$\langle \partial / \partial R \rangle \exp \left[ - (R - R_m) / \xi \right] \quad (5.5)$$

$$R > R_m$$

gedämpft werden. Dann hängen die Lochamplituden aber von der Breite  $\xi$  und dem Abstand  $R_m$ , von dem ab der exponentielle Abfall einsetzt, ab. In Kapitel VI.1, Figur 8, wird der Amplitudenverlauf in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand für zwei verschiedene  $R_m$  ge-

zeigt. Die Endamplituden hängen derart stark von dem Parameter  $R_m$  ab, daß dadurch willkürliche Ergebnisse für die Ionisation zustande kommen. Daher mußte in den weiteren Rechnungen auf die Berücksichtigung der radialen Kopplung verzichtet werden, obwohl diese gegenüber der Rotationskopplung nicht vernachlässigbar ist.

## V.2 Rotationsmatrixelemente

Der Rotationsanteil am  $\partial/\partial t$  - Operator wird durch die intrinsische Rotation der Quasimoleküle mit der Winkelgeschwindigkeit  $\vec{\omega} = \omega \vec{e}_x = \frac{1}{R^2} \hbar v_\infty \vec{e}_x$  hervorgerufen. Zur Berechnung der Rotationsmatrixelemente werden nach Edmonds (27) die Operatoren  $J_+$  und  $J_-$  so eingeführt, daß

$$J_x = \frac{1}{2} (J_+ + J_-) \quad (5.6)$$

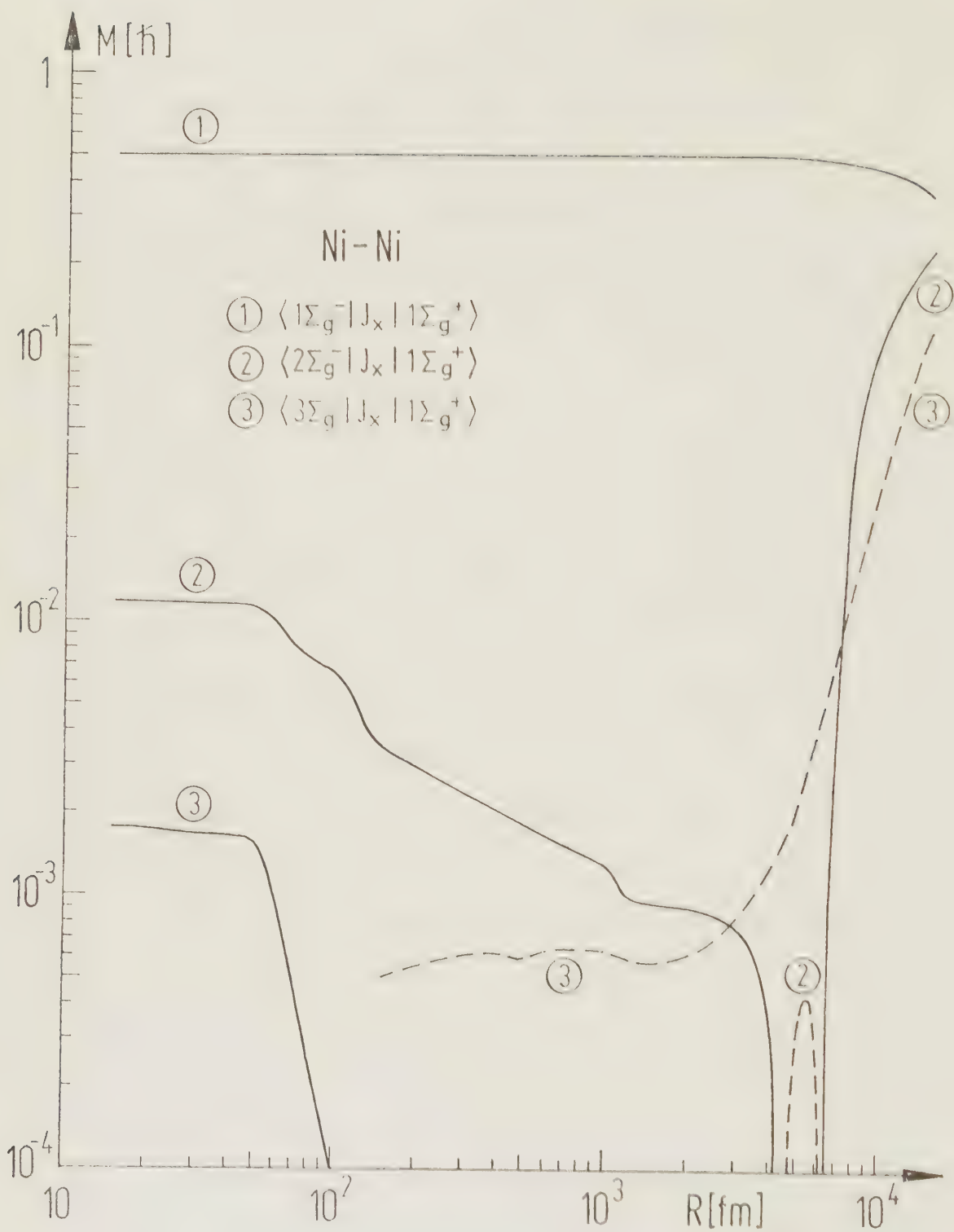
Angewandt auf die Wellenfunktion  $|j, \mu\rangle$  mit Gesamtdrehimpuls  $j$  und magnetischer Quantenzahl  $\mu$  erhält man (28,29)

$$J_x |j, \mu\rangle = \frac{1}{2} \hbar \left( \left[ (j-\mu)(j+\mu+1) \right]^{1/2} |j, \mu+1\rangle + \left[ (j+\mu)(j-\mu-1) \right]^{1/2} |j, \mu-1\rangle \right) \quad (5.7)$$

Mit (5.2) als Anfangs- und (5.3) als Endzustand lassen sich dann die Rotationsmatrixelemente berechnen. Bei Vertauschung von Anfangs- und Endzustand gilt folgende Symmetriebeziehung:

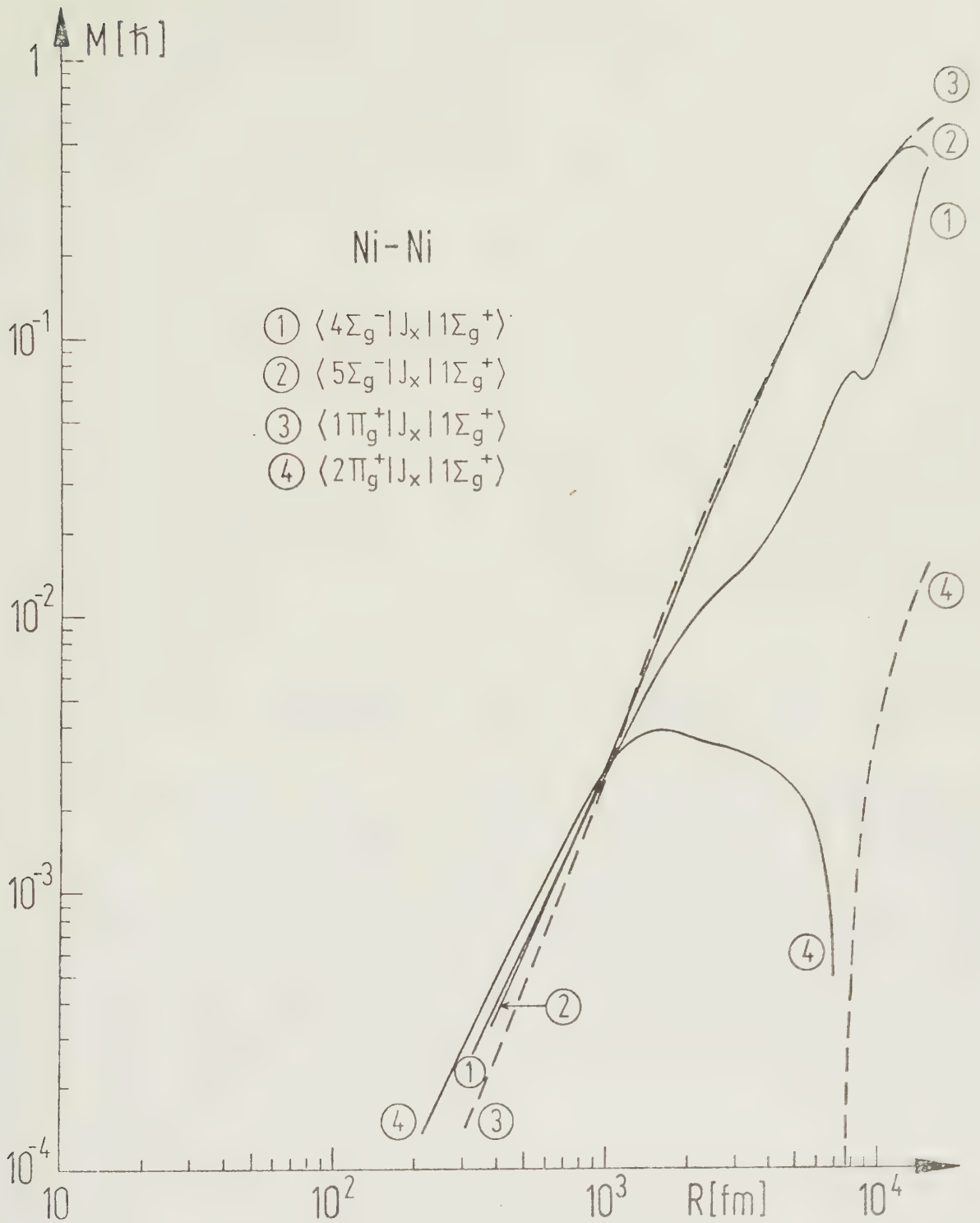
$$\langle \phi_{f, -\mu}(\vec{r}) | J_x | \phi_{i, \mu}(\vec{r}) \rangle = \langle \phi_{i, -\mu}(\vec{r}) | J_x | \phi_{f, \mu}(\vec{r}) \rangle \quad (5.8)$$

Für die Corioliswechselwirkung gilt die Auswahlregel  $|\Delta\mu| = 1$ . Unter Berücksichtigung der Symmetriebeziehung (5.8) und der Auswahlregel ergeben sich dann z.B. 7 Rotationsmatrixelemente zum  $1\Sigma_g$  - Zustand, die in Figur 6a und b gezeigt werden.



Figur 6 a-b:

Die Rotationsmatrixelemente des Ni - Ni - Quasimoleküls zum  $1\Sigma_g$  - Zustand in Abhängigkeit vom



Zweizentrenabstand  $R$  . — entspricht positivem, --- negativem Vorzeichen.

### V.3 Strahlungsmatrixelemente

Um über den Winkelanteil der fouriertransformierten Strahlungsmatrixelemente (2.11)

$$H_{\vec{k}\lambda}^{nm} = \quad (5.9)$$

$$= \frac{e}{(V \cdot 2\omega)^{1/2}} \int dt e^{i\omega t} \langle \psi_n | \vec{\epsilon}_{\vec{k}\lambda}^* e^{-i\vec{k}\vec{x}} \vec{r} | \psi_m \rangle$$

analytisch integrieren zu können, wird das Strahlungsfeld in Multipole entwickelt (30). Nach einigen Umformungen (13) lautet die Entwicklung des konjugiert komplexen Feldes schließlich

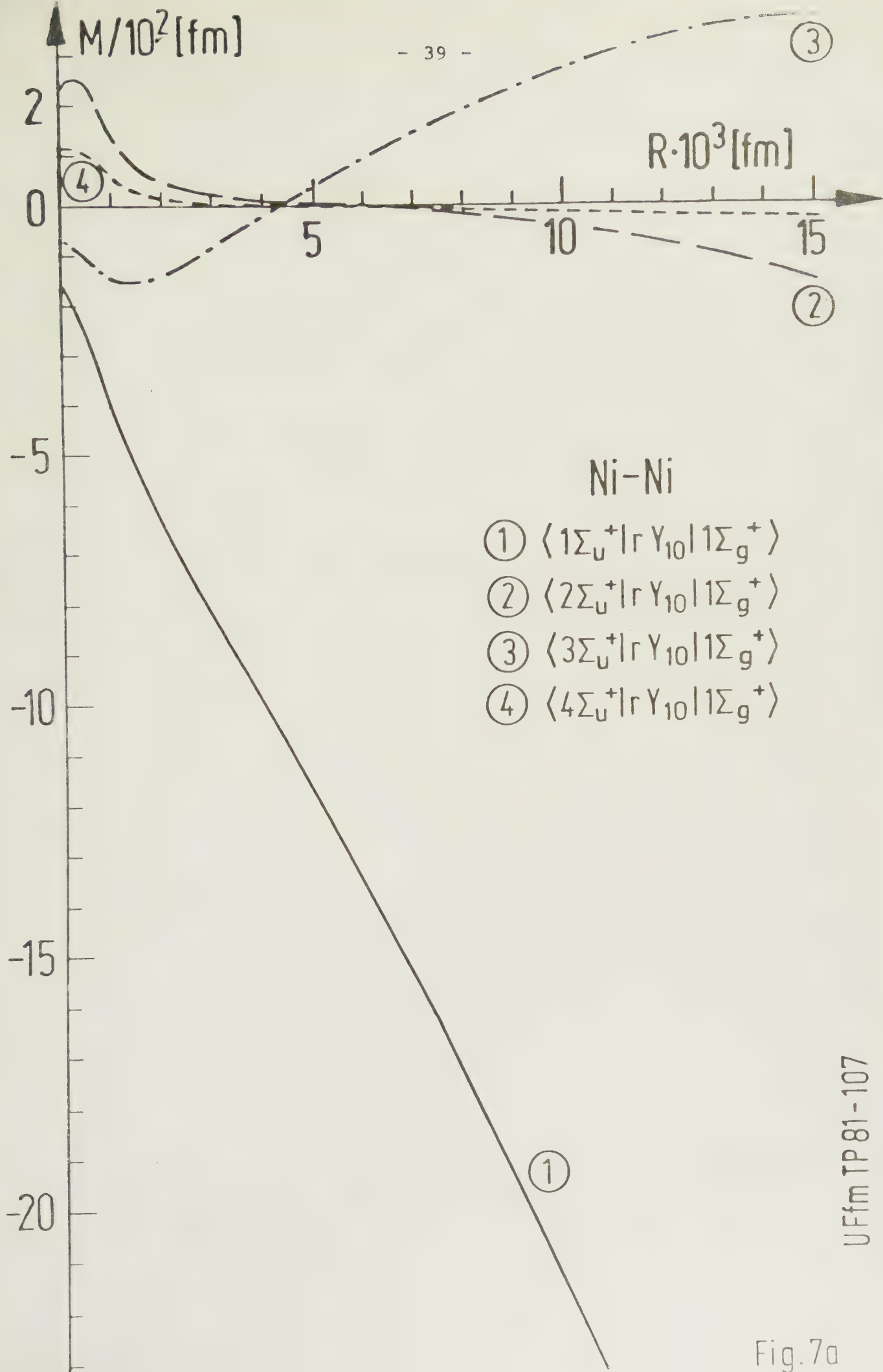
$$\vec{\epsilon}_{\lambda}^* e^{-i\vec{k}\vec{x}} = \quad (5.10)$$

$$\sqrt{2\pi} (-)^{\lambda+1} \sum_L \sum_M (-i)^L (2L+1)^{1/2} D_{M\lambda}^L \left[ \vec{A}_{LM}^{(m)} - i\lambda \vec{A}_{LM}^{(e)} \right]$$

wobei nur der transversale Anteil berücksichtigt wurde. Wegen  $\vec{\epsilon}_{\lambda} \cdot \vec{k} = 0$  nimmt  $\lambda$  nur die Werte  $\pm 1$  an.  $D_{M\lambda}^L$  sind Drehmatrizen, die aus dem Photonen-System  $S_3$  in das mitrotierende System  $S_2$  transformieren.  $\vec{A}_{LM}^{(m)}$  und  $\vec{A}_{LM}^{(e)}$  sind der nach Vektorkugelfunktionen entwickelte magnetische und elek-

Figur 7 a-c:

Die Dipolmatrixelemente der drei inneren Schalen in den  $1\Sigma_g$ -Zustand im Grenzfall langer Wellenlängen in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand  $R$ .



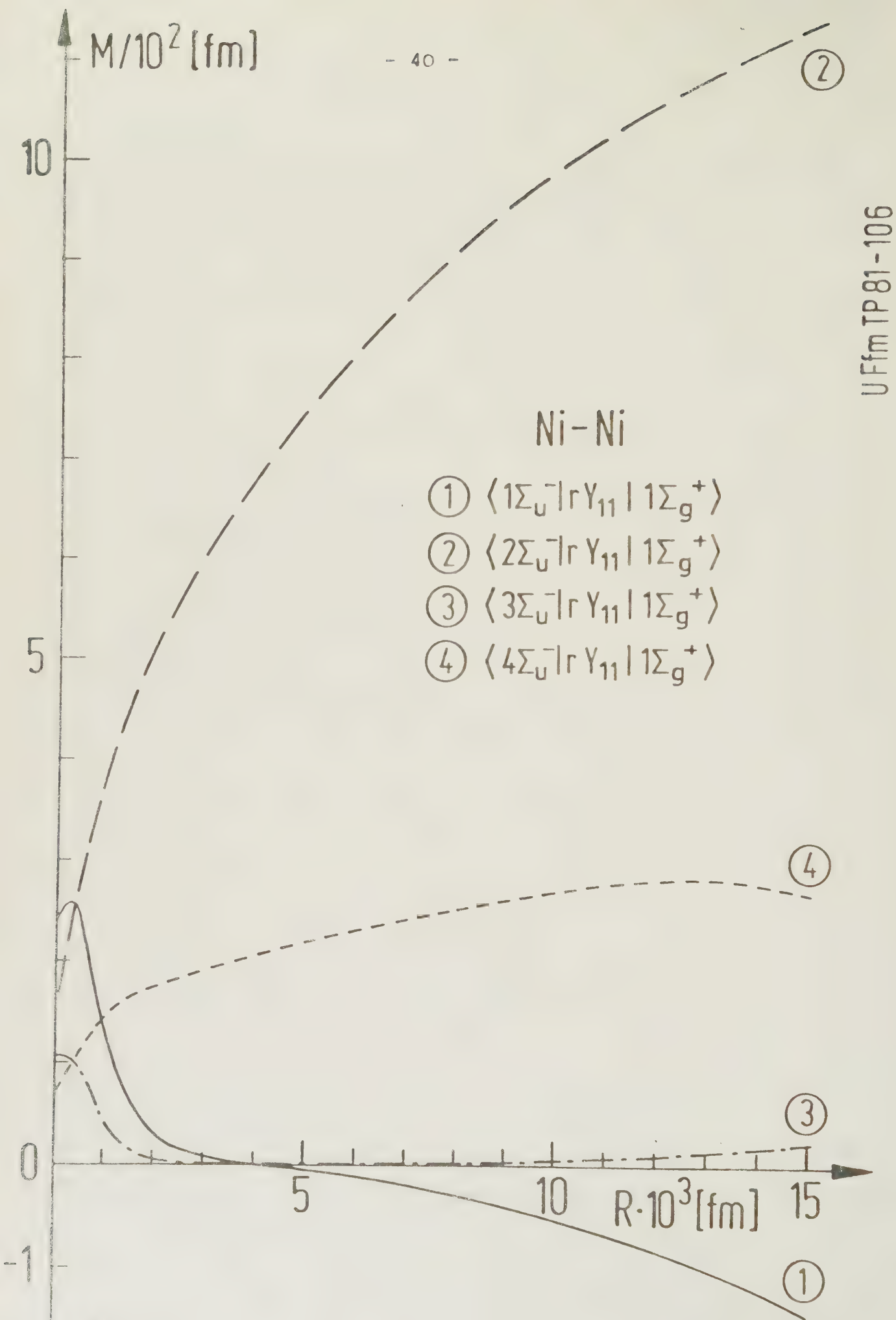


Fig. 7b

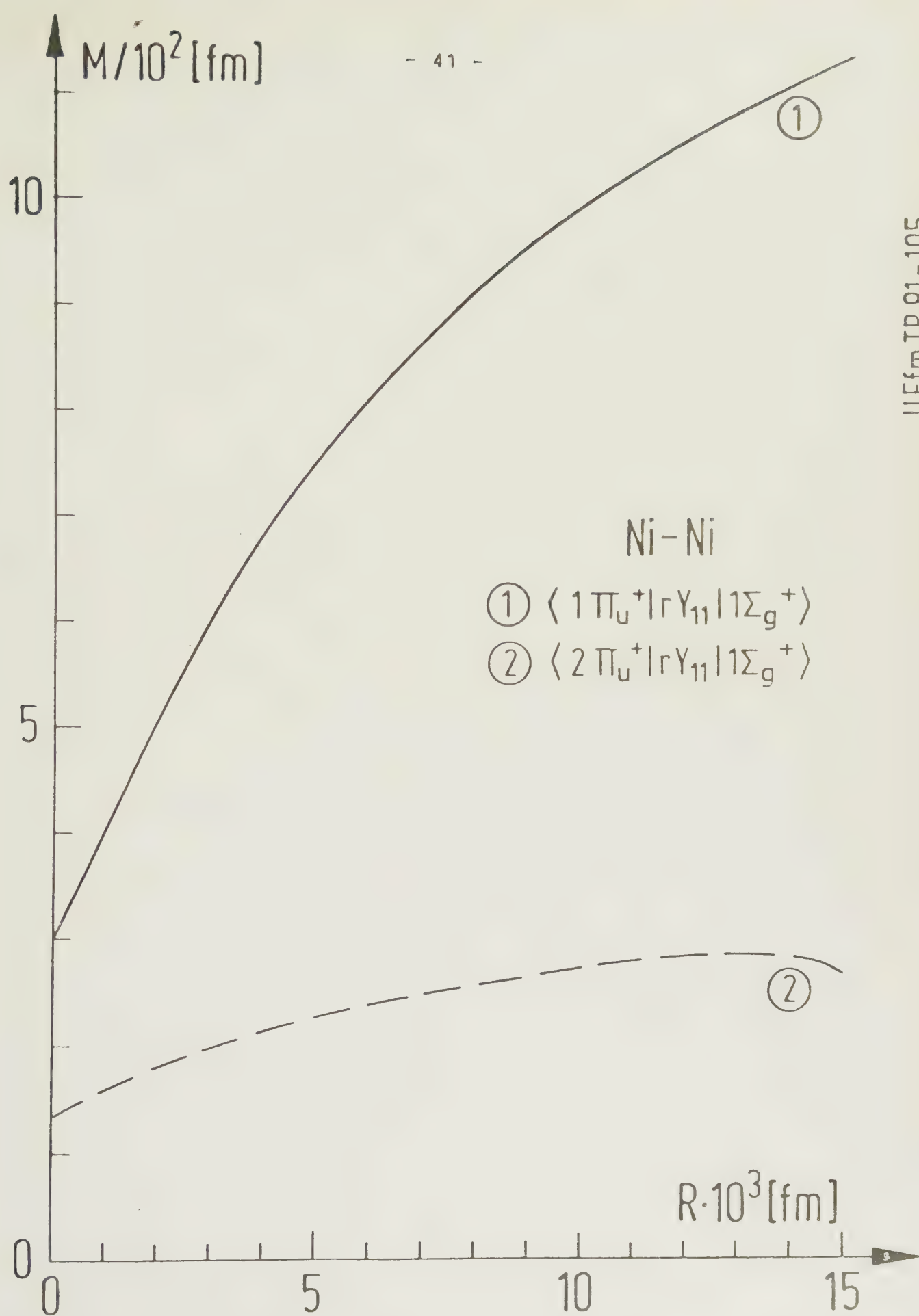


Fig. 7c

trische Anteil der Strahlung. So erhält man für die Strahlungsmatrixelemente schließlich

$$\langle \psi_{\mu_f} | \vec{\epsilon}_{\lambda}^* e^{-i\vec{k}\vec{x}} \vec{\epsilon}_{\lambda} | \psi_{\mu_i} \rangle = \quad (5.11)$$

$$\sqrt{2\pi} \sum_L (-i)^{L-1} D_{\mu_f - \mu_i, \lambda}^L (ML_{\mu_f \mu_i} - i\lambda EL_{\mu_f \mu_i})$$

Nun wird die Dipolnäherung eingeführt, wodurch die Summe in (5.11) zusammenbricht, und als dominanter Anteil die E1 - Strahlung übrigbleibt. Der Grenzfall langer Wellenlängen führt außerdem dazu, daß der  $j_2$  - Anteil der Besselfunktionen vernachlässigt werden kann, weil er für kleine  $\vec{k} \cdot \vec{x}$  gegenüber dem  $j_0$  - Anteil sehr klein ist. Zusätzlich wird  $j_0$  noch gleich 1 gesetzt. Die so berechneten 10 Dipolmatrixelemente zum  $1\Sigma_g$  - Zustand sind in Figur 7 a-c aufgetragen.

## VI.1 Ionisation

Wie in Kapitel IV.1 Gleichung 4.5 bereits angegeben, ist die Wahrscheinlichkeit im Zustand  $n$  ein Loch zu finden gegeben durch

$$P_n = \sum_{m>F} |b_{mn}^{(+)}(\infty)|^2 \quad (6.1)$$

aus den Übergangsamplituden  $b_{n1}^{(+)}$  können durch die gekoppelten Kanalrechnungen die Locherzeugungsraten bestimmt werden. Im Kapitel V.1 wurde schon gezeigt, daß es nur mit großem Aufwand möglich ist, die radialen Kopplungen in den Rechnungen zu berücksichtigen. Solange man ein exponentielles Abschneiden zur Berücksichtigung der Translation für die radialen Matrixelemente verwendet, hängen die Lochamplituden willkürlich von den Abschneideparametern ab. Dies ist in Figur 8 demonstriert. Es wurde die K - Schalenionisation in Abhängigkeit vom Zweizentren - Abstand berechnet, wobei angenommen wurde, daß zu Beginn K - und L - Schale besetzt und die M - Schale leer sei. Für zwei verschiedene Abstände  $R_m$  bei denen die radialen Matrixelemente exponentiell abgeschnitten wurden, ergaben sich vollständig verschiedene Ionisationswahrscheinlichkeiten. Daher mußte auf eine Berücksichtigung der radialen Kopplung verzichtet werden. Deshalb

war es auch nicht möglich, die Struktur der K - Ionisation in Abhängigkeit vom Stoßparameter, wie sie von H. Schmidt-Böcking und seinen Mitarbeitern gemessen wurde <sup>(31)</sup>, zu reproduzieren. Da aber gezeigt worden ist <sup>(32)</sup>, daß der Doppelstoßprozeß bei Ni - Ni - Stößen dominiert, wurden die vorliegenden Rechnungen mit einer vorgegebenen Ionisation durchgeführt. Dabei wurde angenommen, daß der  $1\Sigma_g$  - Zustand durch den ersten Stoß bereits ionisiert sei und nur die L - Schale besetzt sei.

Figur 8:

Die  $1\Sigma_g$  - Ionisation in Abhängigkeit vom Zweizentrenabstand für zwei verschiedene Abschneideparameter  $R_m$ . K - und L - Schale wurden als besetzt, die M - Schale als leer angenommen.

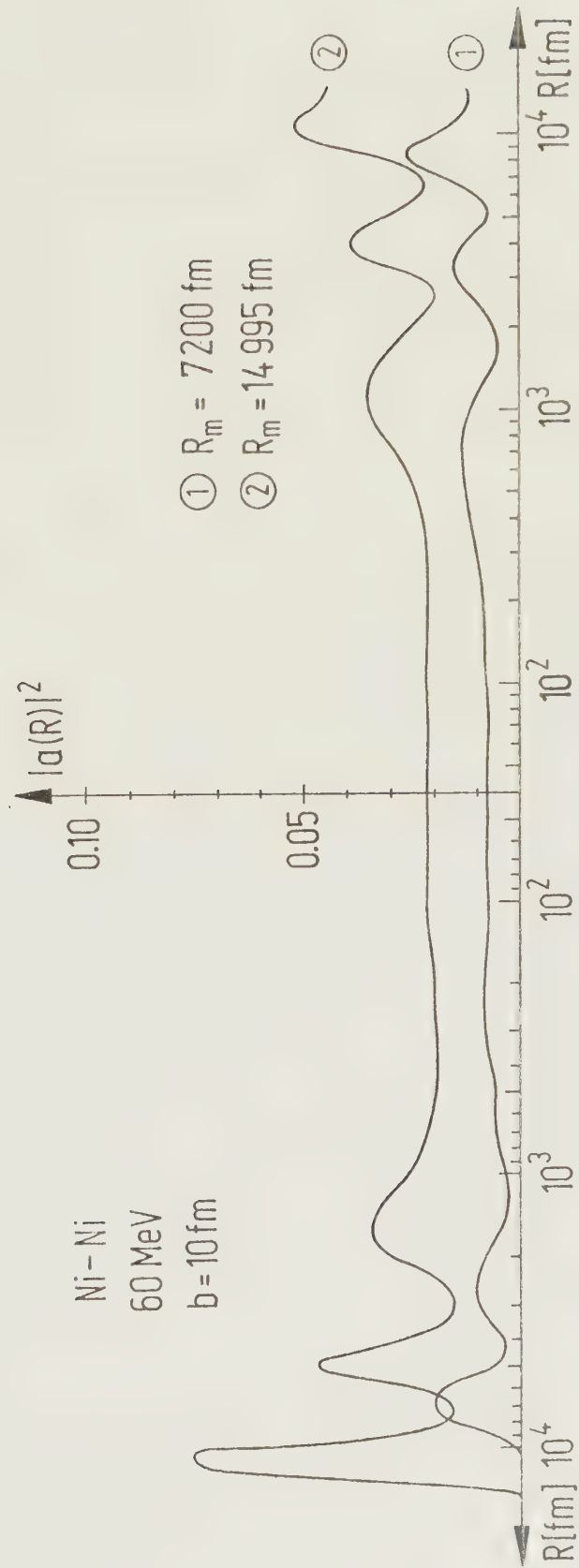


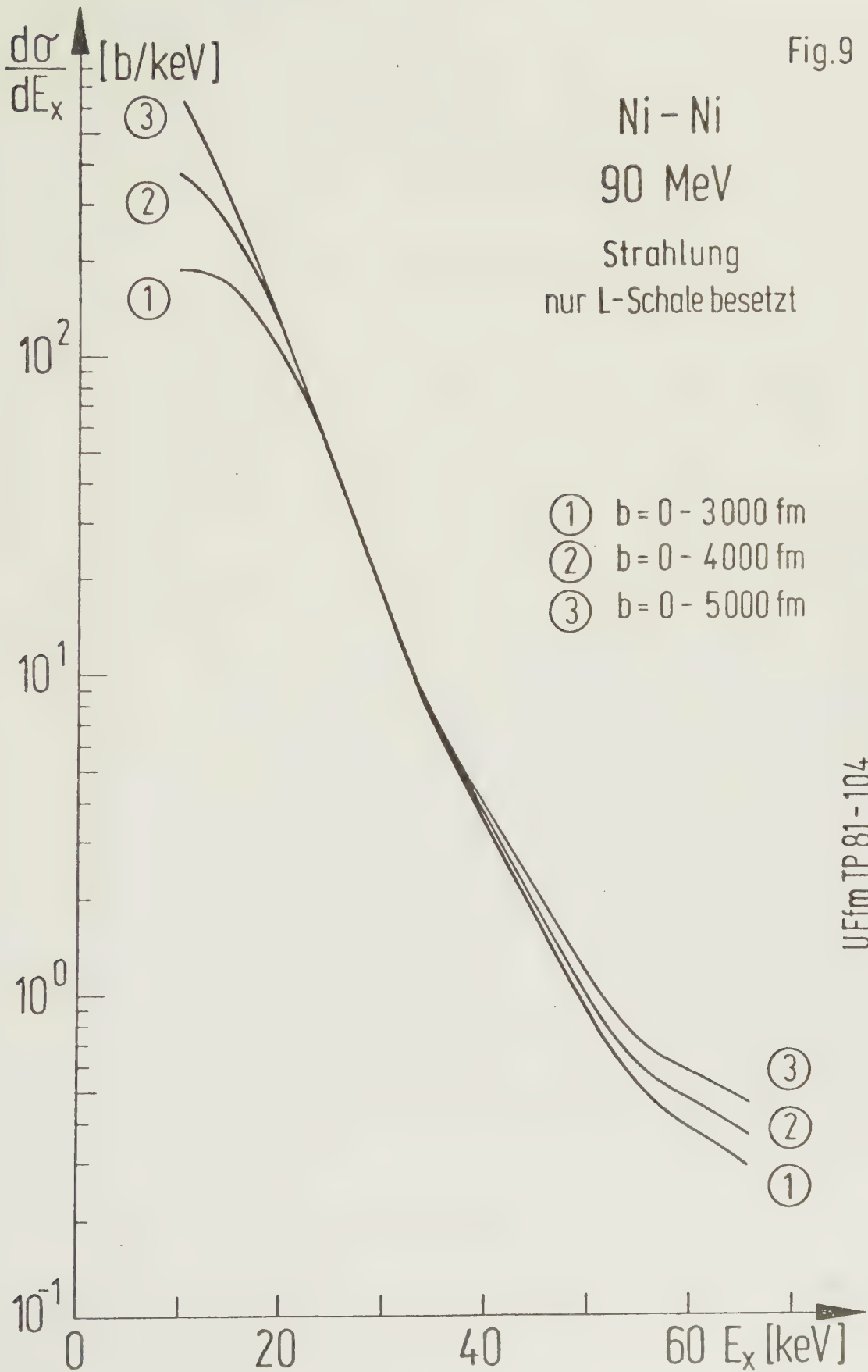
Fig.8

## VI.2 Reine Strahlungsspektren

Zur Berechnung der Spektren und Anisotropien muß eine bestimmte Stoßparameterverteilung vorgegeben werden. Um eine geeignete Verteilung zu finden, wurden Tests bei reinen Strahlungsspektren, also mit vorgegebenen Ionisationswahrscheinlichkeiten ohne radiale und Rotationskopplung, durchgeführt. Dazu wurden die Ionisationsamplituden zeitlich konstant 0 oder 1 gesetzt. Die in Figur 9 gezeigten Spektren wurden für eine Laborenergie von 90 MeV mit jeweils 9 Stoßparametern gerechnet. Es wurde angenommen, daß K - und M - Schale vollständig ionisiert und nur die L - Schale besetzt sei. Wie man sieht, führt eine Erweiterung des Stoßparameterbereichs von 3000 auf 5000 fm nur im Bereich kleiner und sehr großer Frequenzen zu Unterschieden. Die kleinen Frequenzen sind ohnehin von der Theorie nicht richtig erfasst; die großen Frequenzen sind nicht genügend genau gemessen (s. Figur 1). Die Annahme ist daher

Figur 9:

Reine Strahlungsspektren bei 90 MeV Laborenergie für drei verschiedene Stoßparameterbereiche.



gerechtfertigt, daß die in Figur 9 mit 3 bezeichnete Stoßparameterverteilung genügend konvergiert ist. Dabei wurden folgende Stoßparameter verwendet:

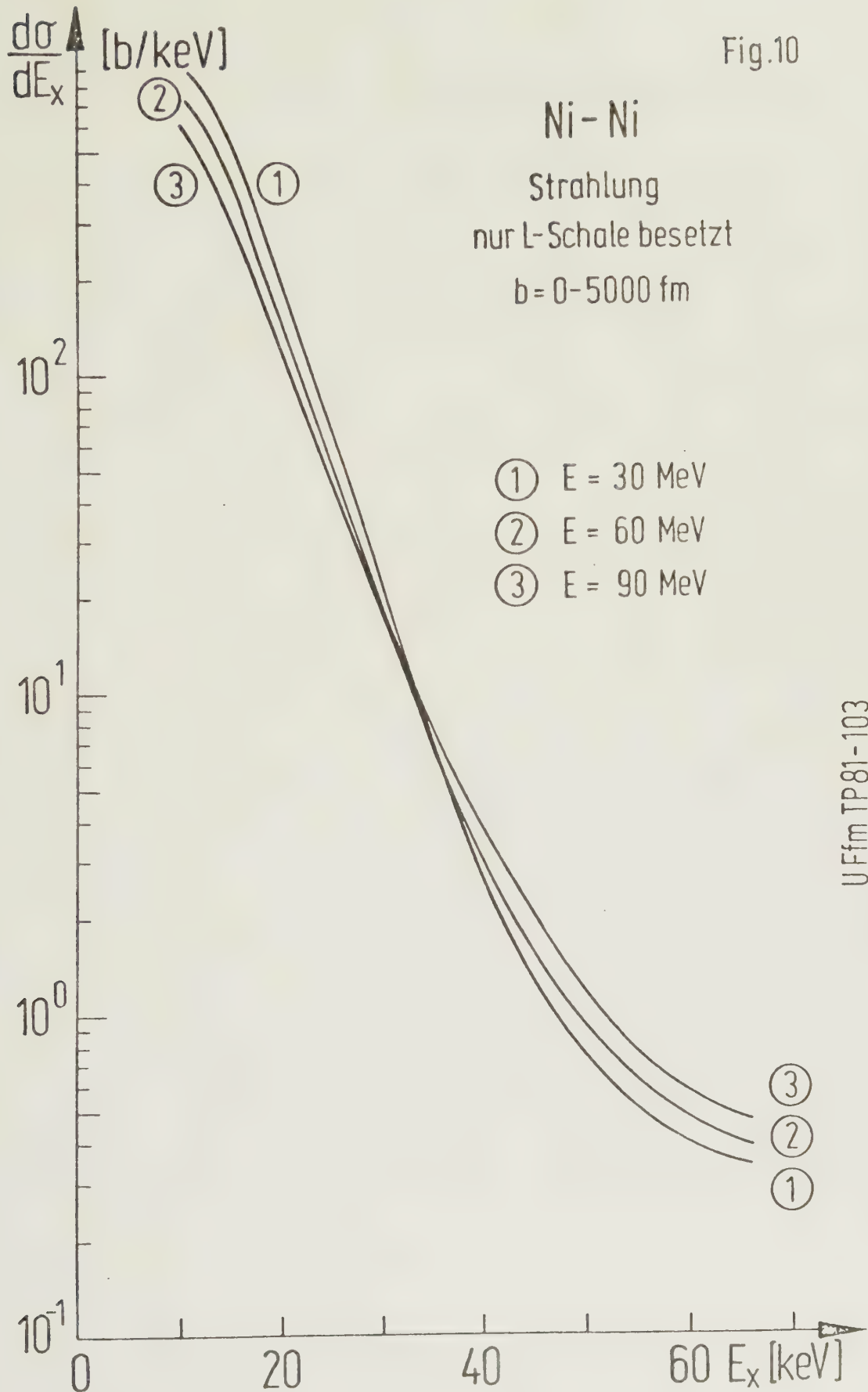
$$b = 0, 500, 1000, 1500, 2000, 2500, 3000, \\ 4000, 5000 \text{ fm}$$

Diese Stoßparameterverteilung wurde für alle weiteren Rechnungen verwendet. Zur Kontrolle wurde bei den abschließenden Rechnungen mit Strahlungs- und Rotationskopplungsmatrixelementen noch ein zusätzlicher Test gemacht, in dem die Anzahl der berücksichtigten Stoßparameter auf 18 erhöht wurde. Es zeigte sich, daß dadurch keine Änderungen des Wirkungsquerschnitts und der Anisotropie auftraten.

Ein weiterer Test war die Untersuchung der Abhängigkeit der Spektren von der Laborenergie. In Figur 10 sind die Spektren für 30, 60 und 90 MeV aufgetragen. Man sieht, daß wie im Experiment (vgl. Figur 1a) nur geringe Abweichungen in der Steilheit des exponentiellen Abfalls bestehen.

Figur 10:

Reine Strahlungsspektren für die Laborenergien 30, 60 und 90 MeV.



### VI.3 Beiträge einzelner Zustände

Um die Stärke einzelner Übergänge zu untersuchen, wurden Spektren berechnet, bei denen jeweils nur die beiden zu einer Energie gehörenden Einteilchenzustände besetzt wurden. Dies geschah für den  $1\Sigma_u^{(\pm)} (2 p_{1/2} \sigma)$ , den  $2\Sigma_u^{(\pm)} (2 p_{3/2} \sigma)$  und den  $1\Pi_u^{(\pm)} (2 p_{3/2} \pi)$  Zustand. Figur 11 a-c zeigt diese Spektren, wobei jeweils mit und ohne angeschaltete Rotationskopplung gerechnet wurde. In den drei Fällen zeigt sich, daß für Photonenenergien kleiner als etwa 20 keV die Rotationskopplung durch Umkopplungen eine Absenkung, für größere Photonenenergien eine Vergrößerung der Spektren bewirkt. Wie beim Pb - Pb - System <sup>(13,33)</sup> sind erwartungsgemäß die Beiträge für den  $2\Sigma_u$  und den  $1\Pi_u$  - Zustand etwa gleich groß, während das Spektrum des  $1\Sigma_u$  - Zustandes bei Photonenenergien unterhalb von 25 keV kleiner ist. Vergleicht man die einzelnen Beiträge mit dem Gesamtspektrum (s. Figur 13), so sieht man, daß die Steigung von  $2\Sigma_u$  und  $1\Pi_u$  - Anteil etwa der des Gesamtspektrums entspricht, wie man es für den dominanten Beitrag erwartet.

Figur 11 a-c:

Für jeweils nur ein einzelnes besetztes Niveau werden die Beiträge bei abgeschalteter (---) und eingeschalteter (—) Rotationskopplung verglichen.

Fig.11a

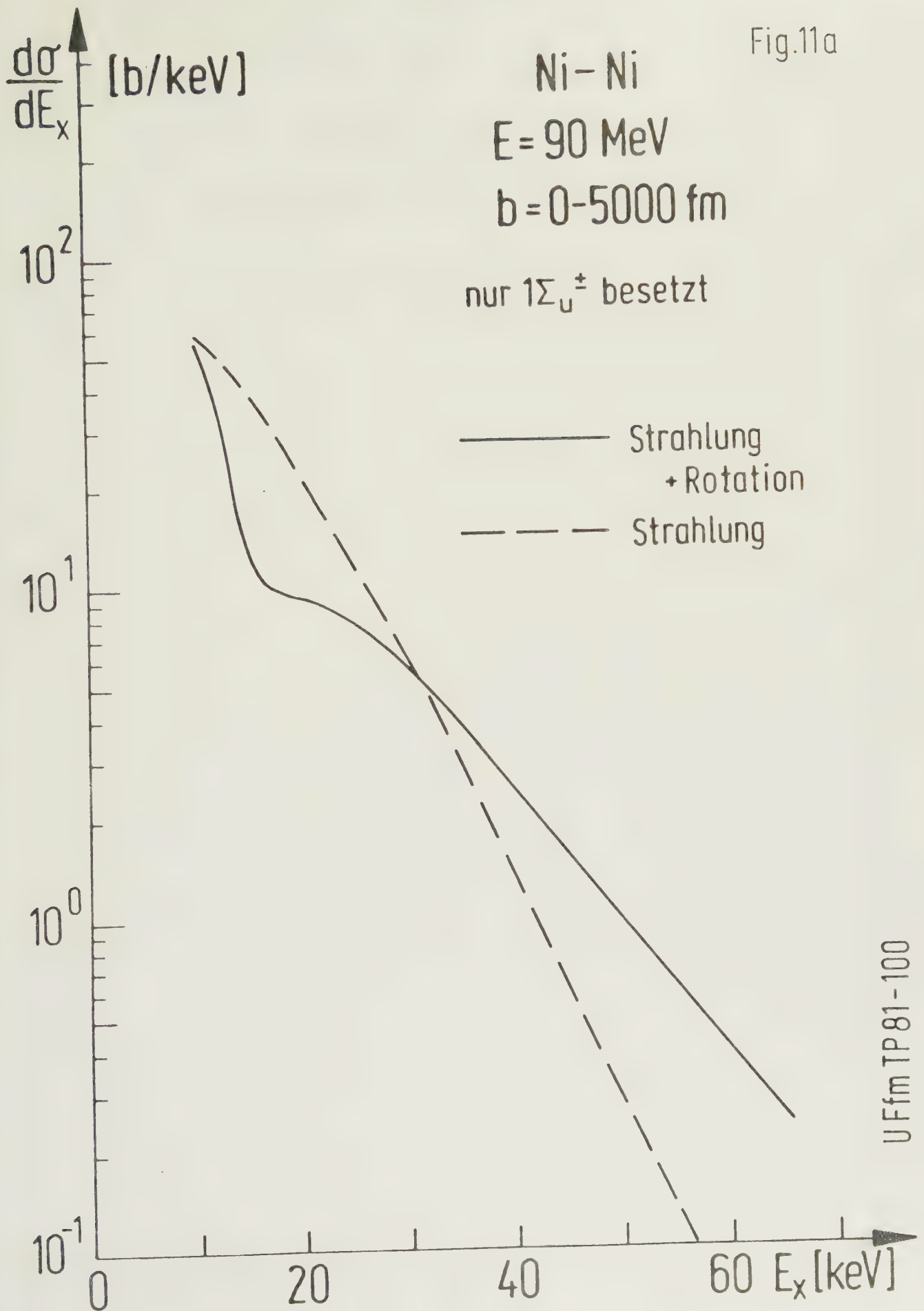


Fig.11 b

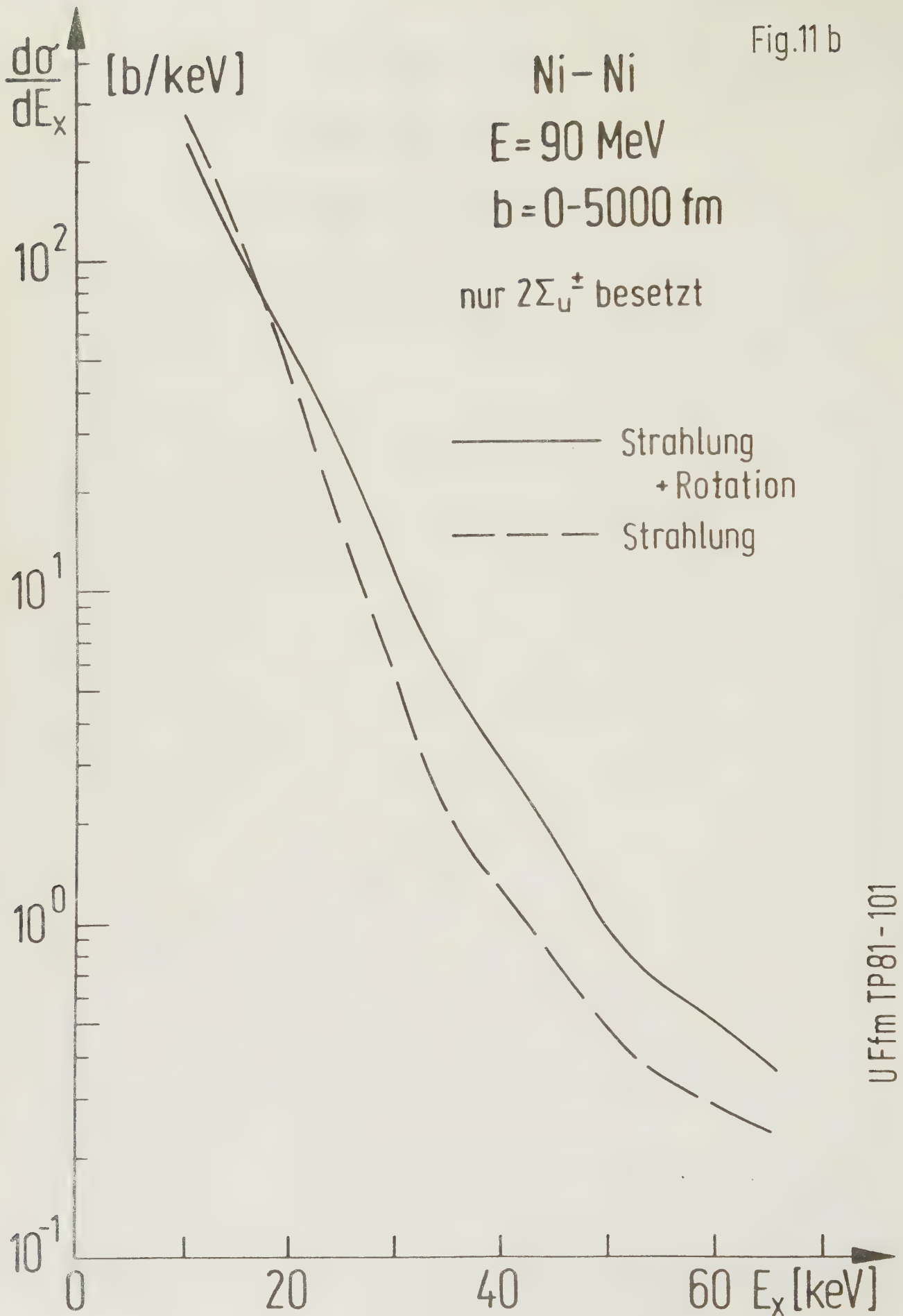
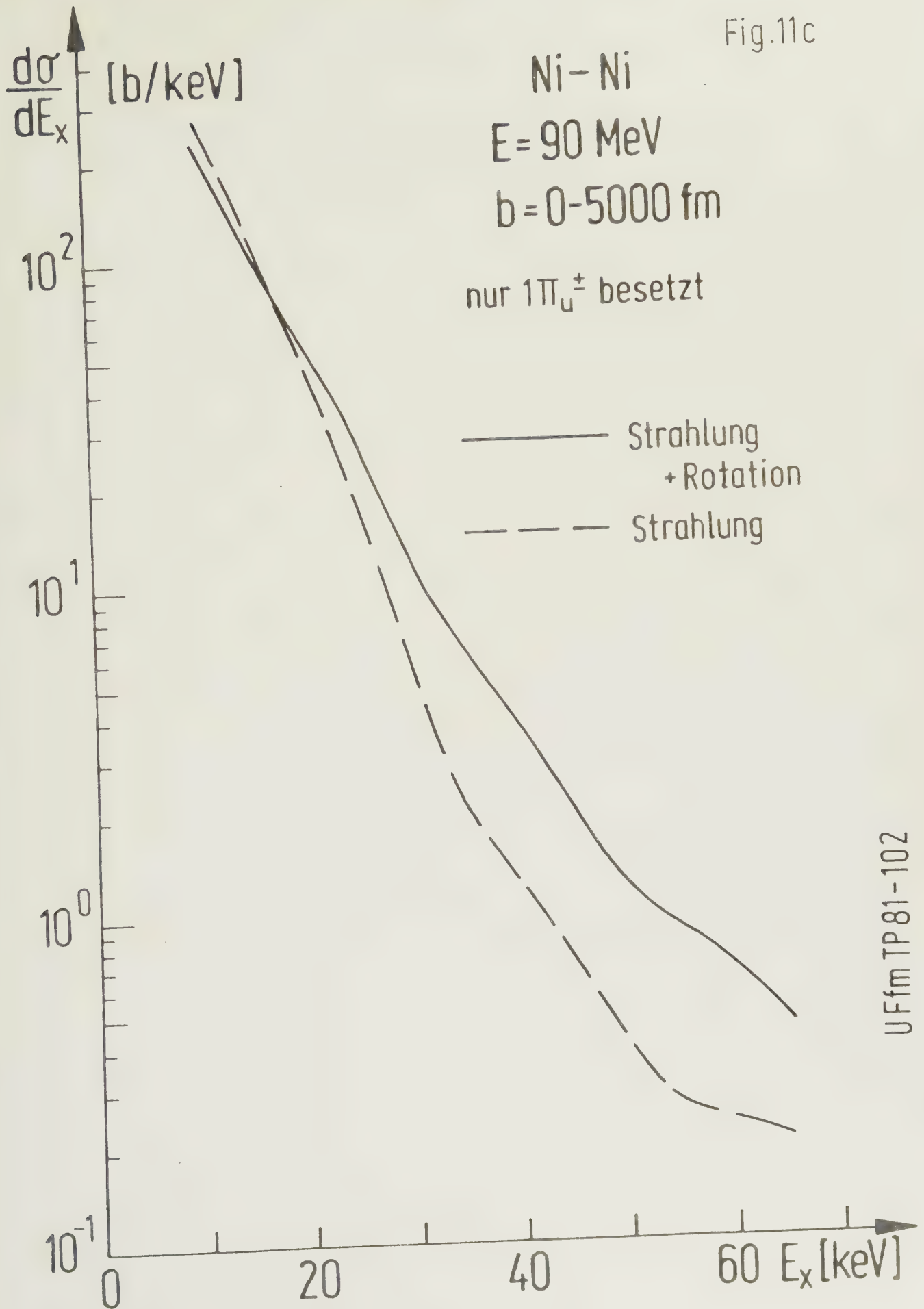


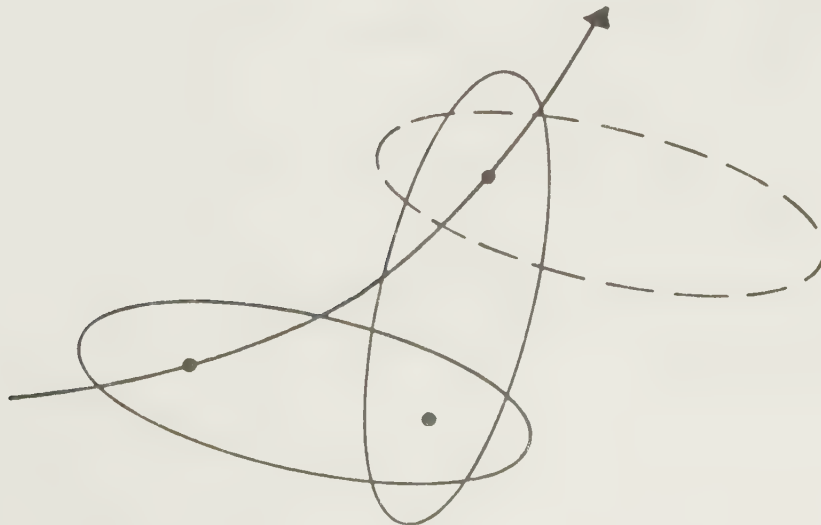
Fig.11c





#### VI.4 Stoßparameterabhängigkeit der differentiellen Querschnitte

Um einen weiteren Test zur Kontrolle der gewählten Stoßparameterverteilung zu haben, wurde der differentielle Strahlungsquerschnitt in Abhängigkeit vom Stoßparameter untersucht, und zwar sowohl für den Fall abgeschalteter Rotations- und radialer Kopplung als auch für eingeschaltete Rotationskopplung. Es zeigt sich, daß für beide Fälle, besonders stark aber bei eingeschalteter Rotationskopplung, eine Oszillationsstruktur auftritt, die mit wachsendem Stoßparameter geglättet wird. Diese Oszillationsstruktur wird durch Interferenzen zwischen ein- und auslaufendem Ast der Bahn hervorgerufen. Vermutlich ist der sogenannte "slippage" - Effekt <sup>(34)</sup> dafür verantwortlich. Die Skizze soll stark übertrieben das Prinzip des slippage - Effektes veranschaulichen.



Würde die Orientierung der Elektronenzustände der raschen Bewegung der internuklearen Achse am Umkehrpunkt folgen können, lägen die Zustände symmetrisch zum Umkehrpunkt (in der Skizze durchgezogene Bahnen). Da aber die Tendenz zur Beibehaltung der Orientierung besteht (hier durch die gestrichelte Linie veranschaulicht) tauschen  $\Sigma$  und  $\Pi$  - Zustände die Orientierung gegenüber der internuklearen Achse, und sind daher nicht symmetrisch zum Bahnumkehrpunkt. Für größere Stoßparameter fallen die differentiellen Strahlungsquerschnitte immer stärker ab, und ihre Beiträge zum gesamten Spektrum werden immer weiter zu kleineren Photonenenergien verschoben. Damit zeigt sich, daß ein Stoßparameterbereich bis 5000 fm, wie er für die vorliegenden Rechnungen benutzt wurde, groß genug ist, um die wesentlichen Beiträge zum Spektrum zu erfassen.

Figur 12 a-d:

Die differentiellen Strahlungsquerschnitte bei einer Laborenergie von 90 MeV für die Stoßparameter 0, 20, 250, 500, 1000, 1500, 2000, 3000 fm. Es wird jeweils der Fall mit (—) und ohne (---) eingeschaltete Rotationskopplung miteinander verglichen.

Fig.12a

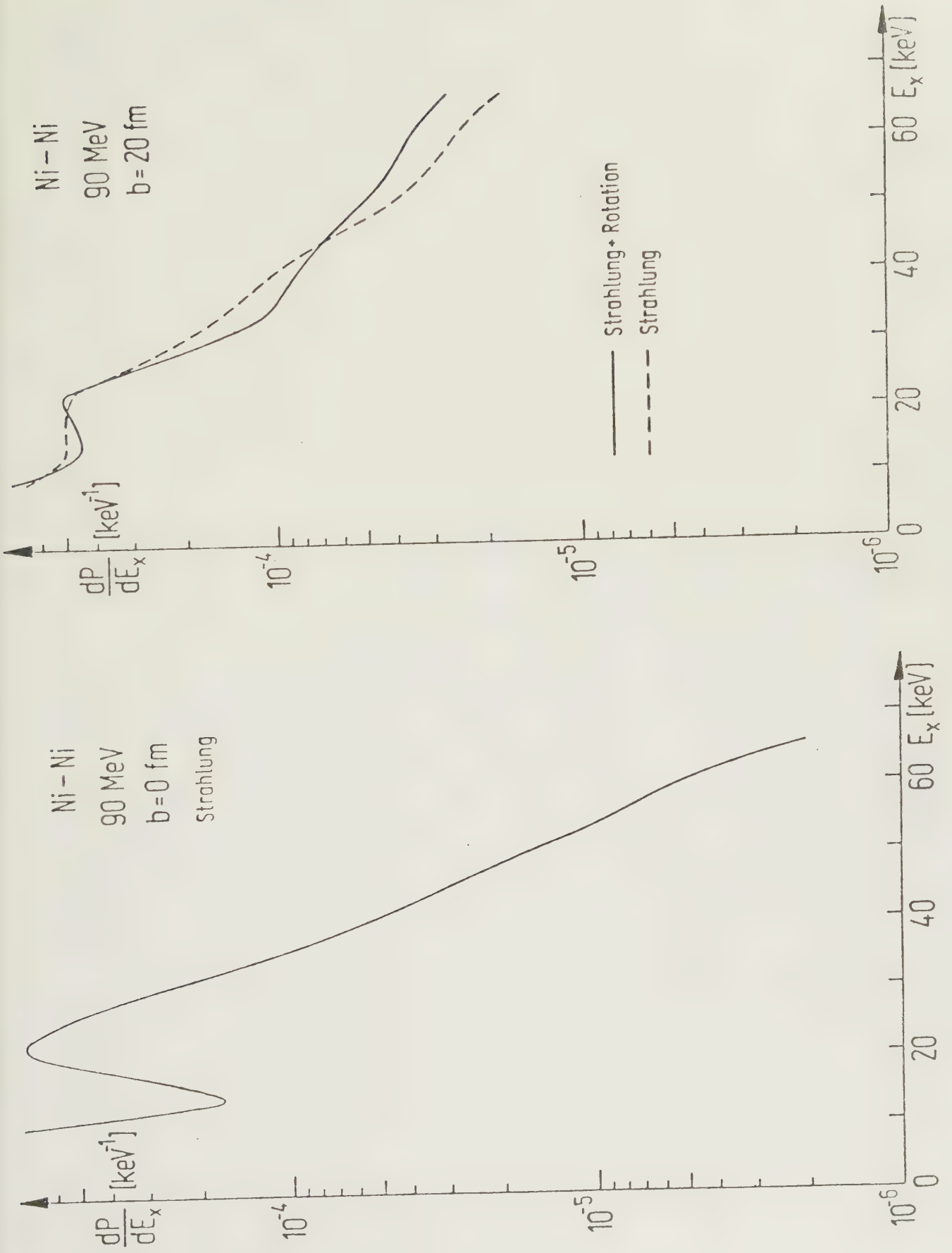


Fig.12 b

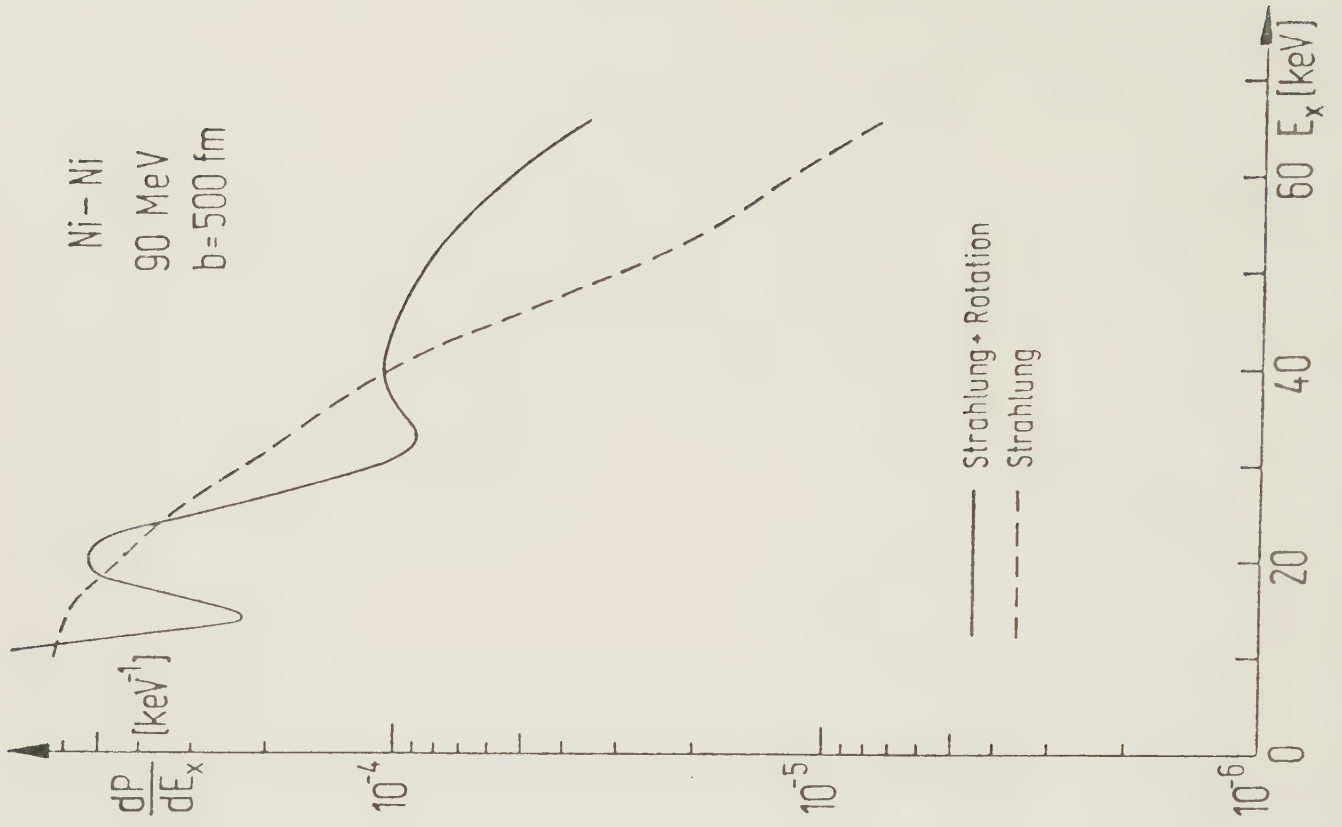
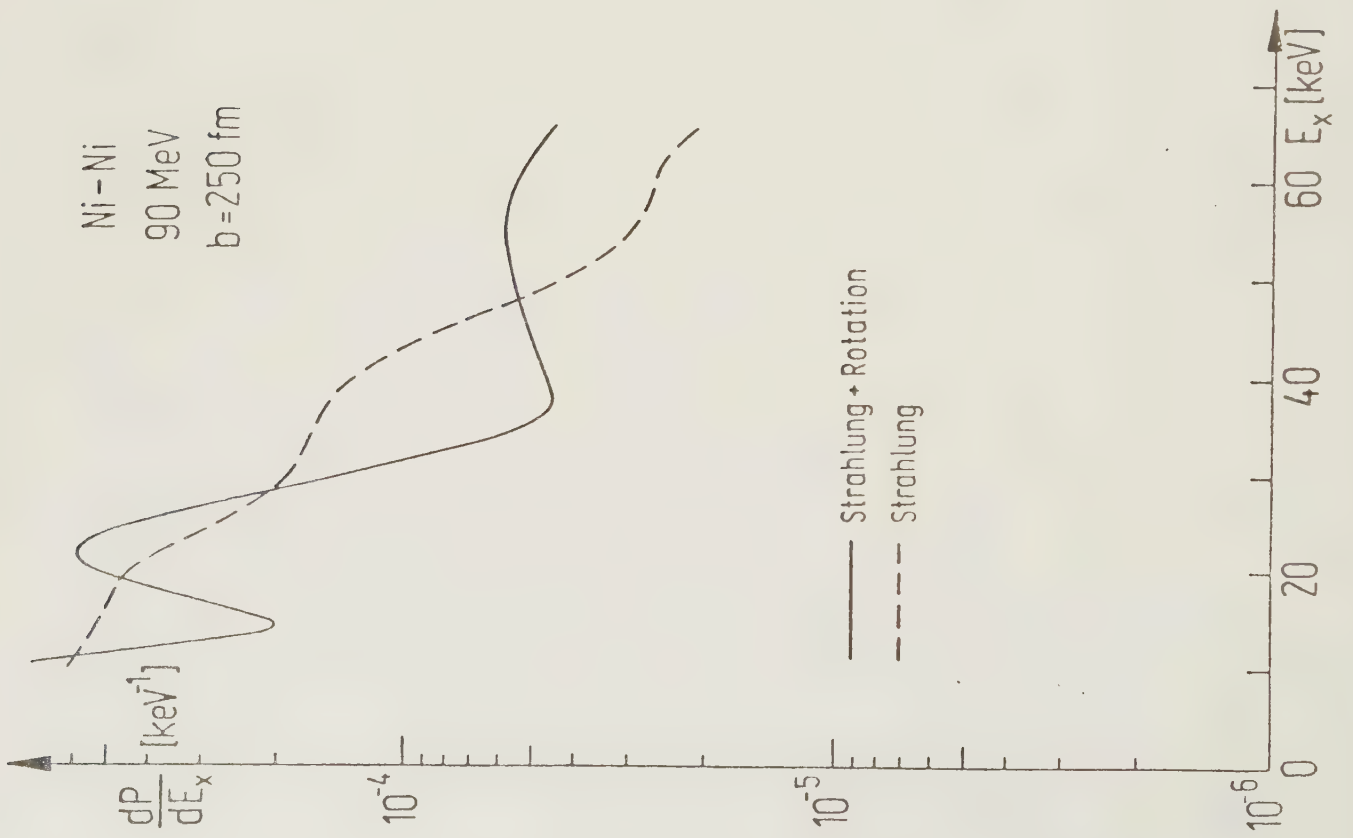


Fig.12c

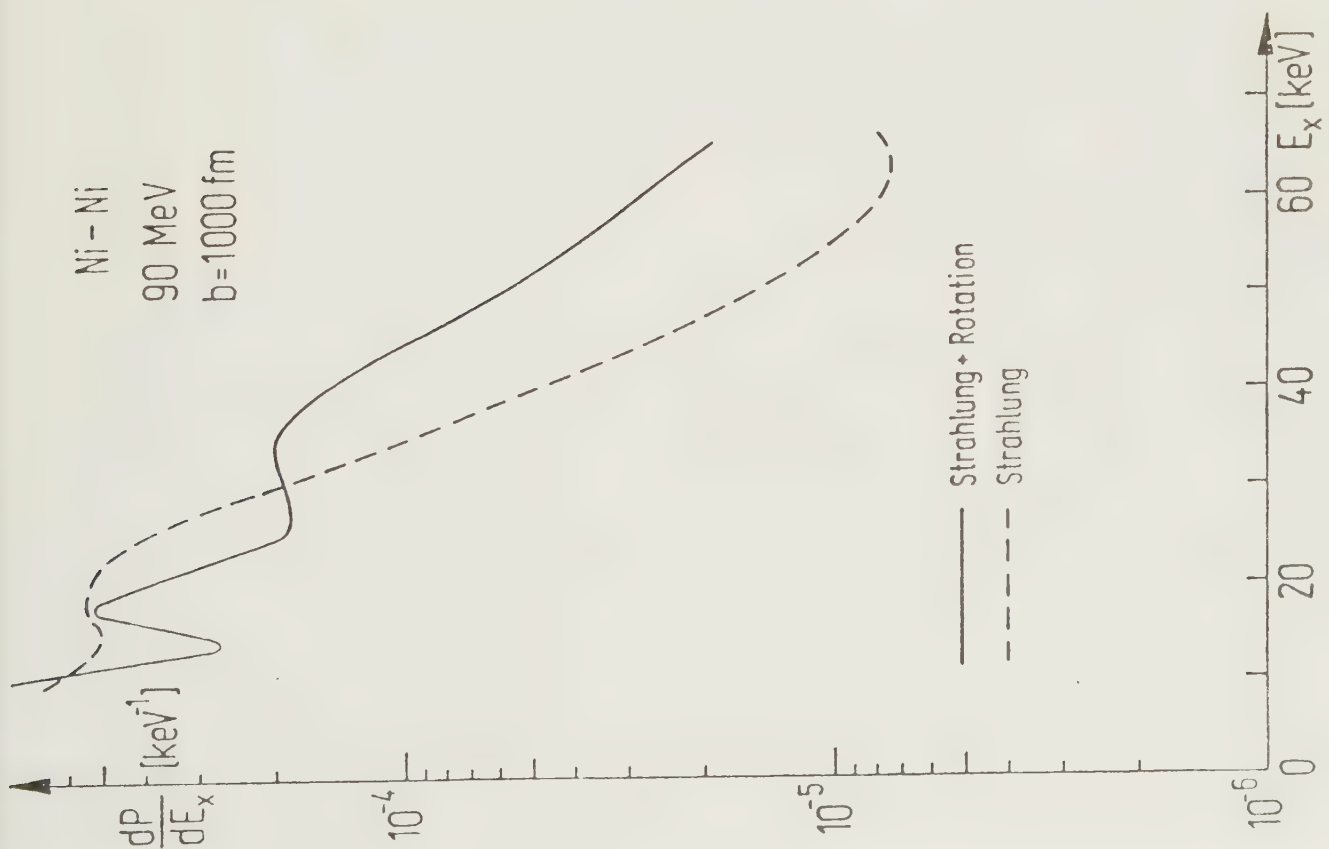
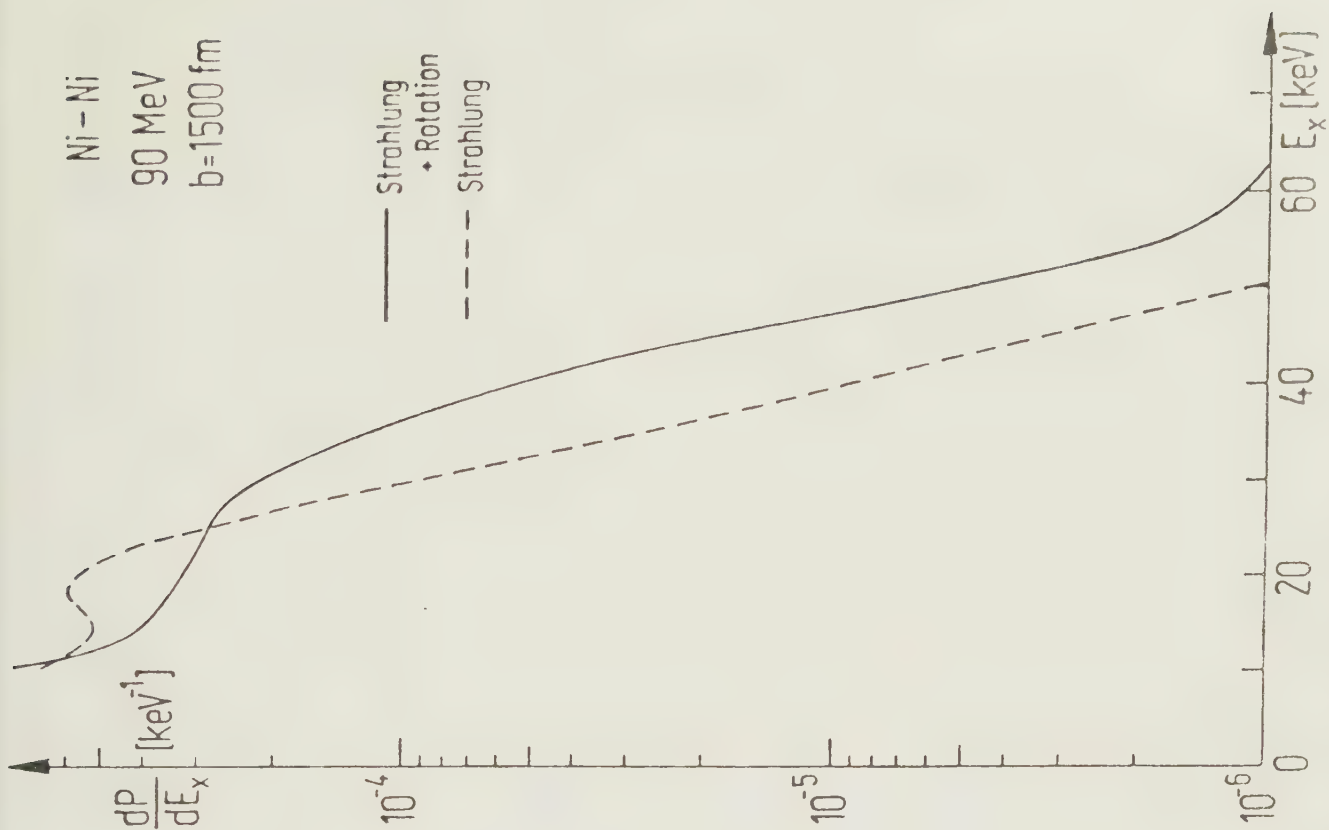
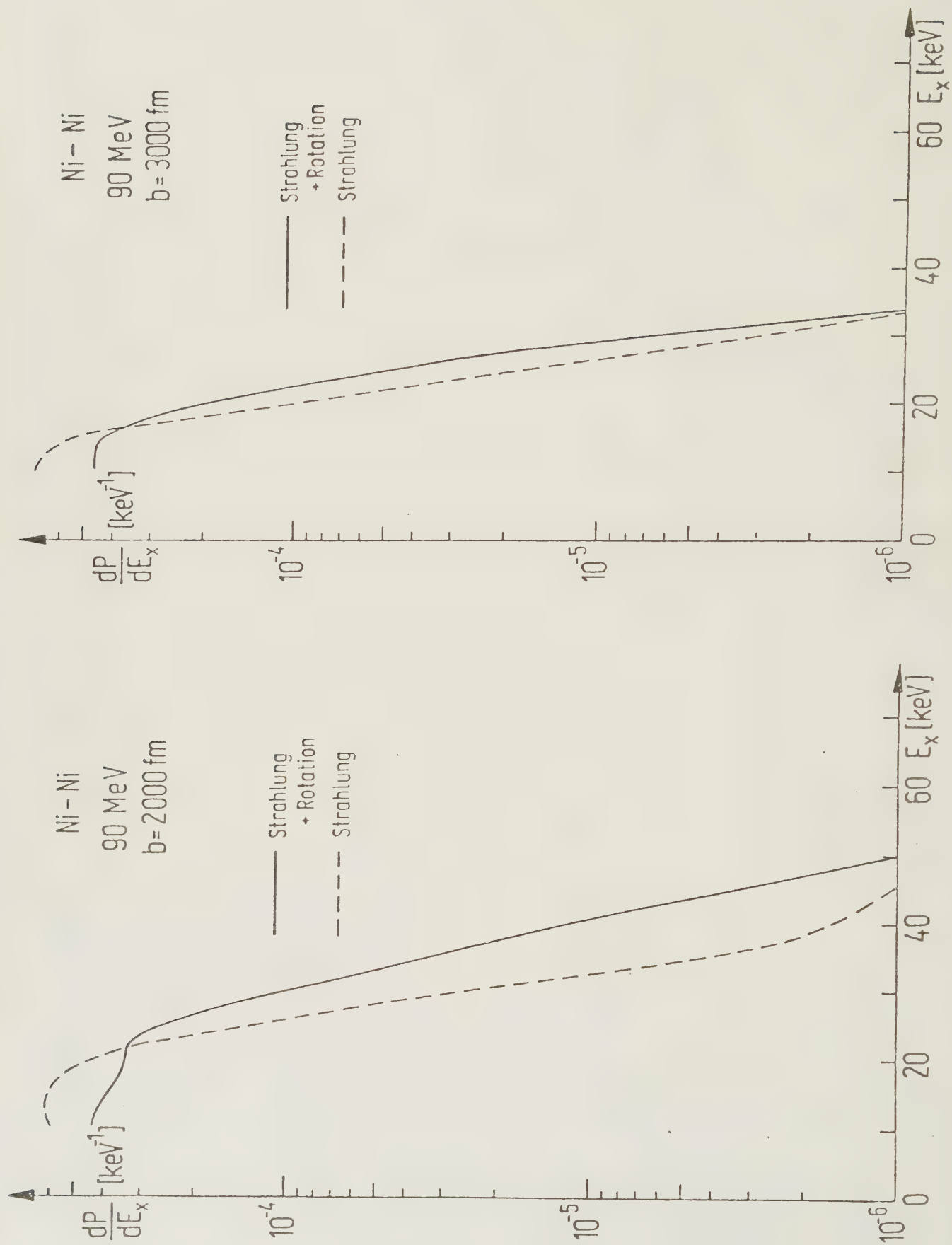


Fig.12 d



## VII. Wirkungsquerschnitte und Anisotropien

Im Kapitel II.3 wurden die Ausdrücke für das Spektrum (2.30) und die Anisotropie (2.31) bereits angegeben. Die folgenden Ergebnisse wurden alle mit der Konfiguration erzielt, bei der nur die L - Schale besetzt, K - und M - Schale leer waren. In allen Fällen wurde die in VI.2 erwähnte Stoßparameterverteilung verwendet.

Der Vergleich der Rechnungen für 90 MeV mit dem Experiment von Greenberg et al. bei 91.5 MeV in Figur 13 zeigt, daß der exponentielle Abfall des Spektrums nicht steil genug ist. Außerdem liegen die errechneten Werte unterhalb der gemessenen, wie es auch bei den Rechnungen von R. Anholt der Fall ist (35).

Figur 13:

Ni - Ni - Spektrum für eine Laborenergie von 90 MeV , mit (—) und ohne (— — —) eingeschaltete Rotationskopplung. Zum Vergleich ist das experimentelle Spektrum von Greenberg et al. bei 91.5 MeV eingetragen (7).

Die  $K_{\alpha}$  - und  $K_{\beta}$  - Energie des vereinigten Systems ist durch Pfeile gekennzeichnet.

Ni-Ni

Fig.13

90 MeV

nur L-Schale besetzt

b = 0-5000 fm

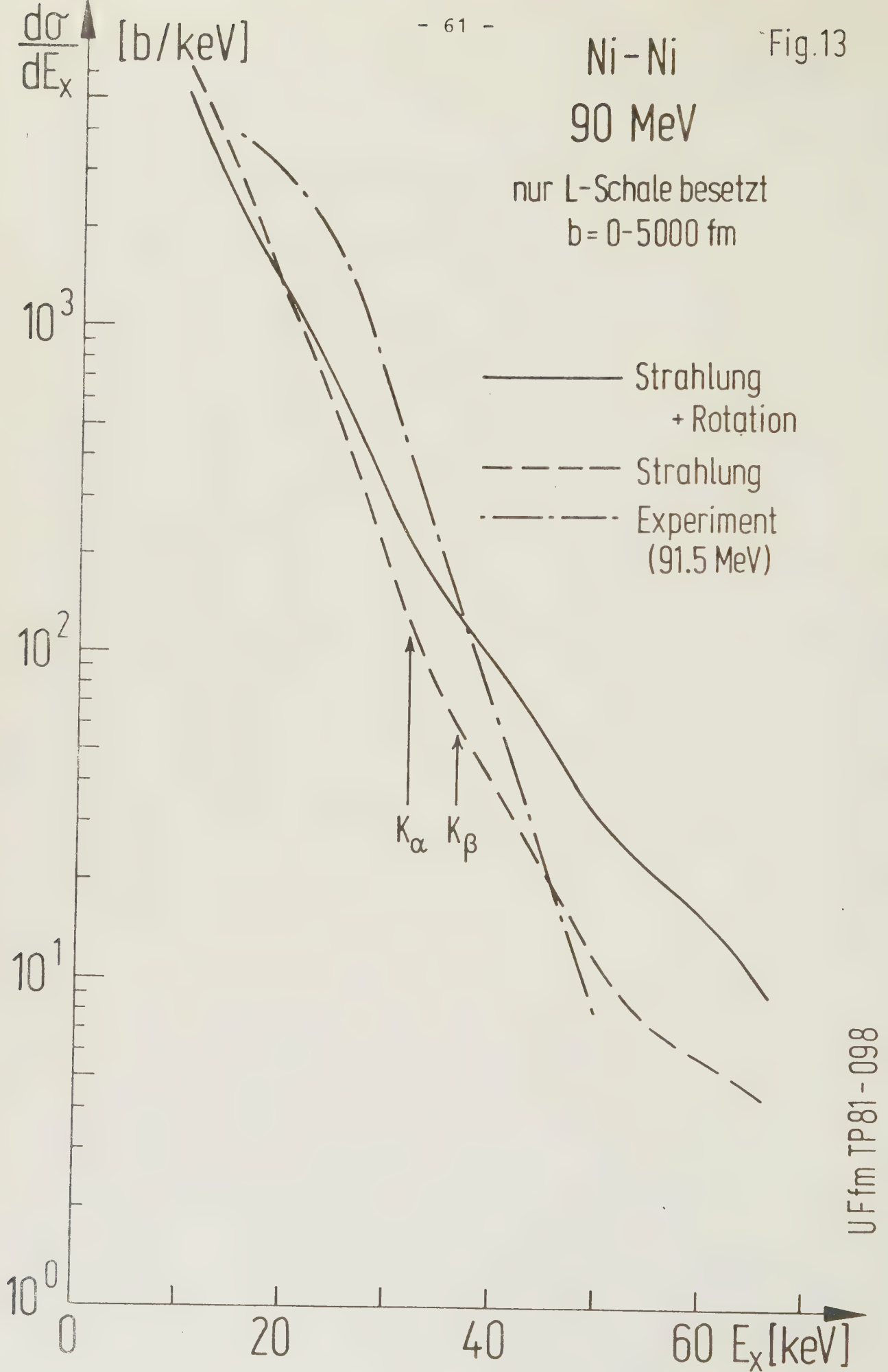


Fig.14

Ni-Ni

nur L-Schale besetzt

b = 0-5000 fm

Strahlung + Rotation

$\frac{d\sigma}{dE_x}$  [b/keV]

$10^3$

$10^2$

$10^1$

$10^0$

① E = 30 MeV

② = 60 MeV

③ = 90 MeV

$K_\alpha$

$K_\beta$

UFFm TP81-097

③

②

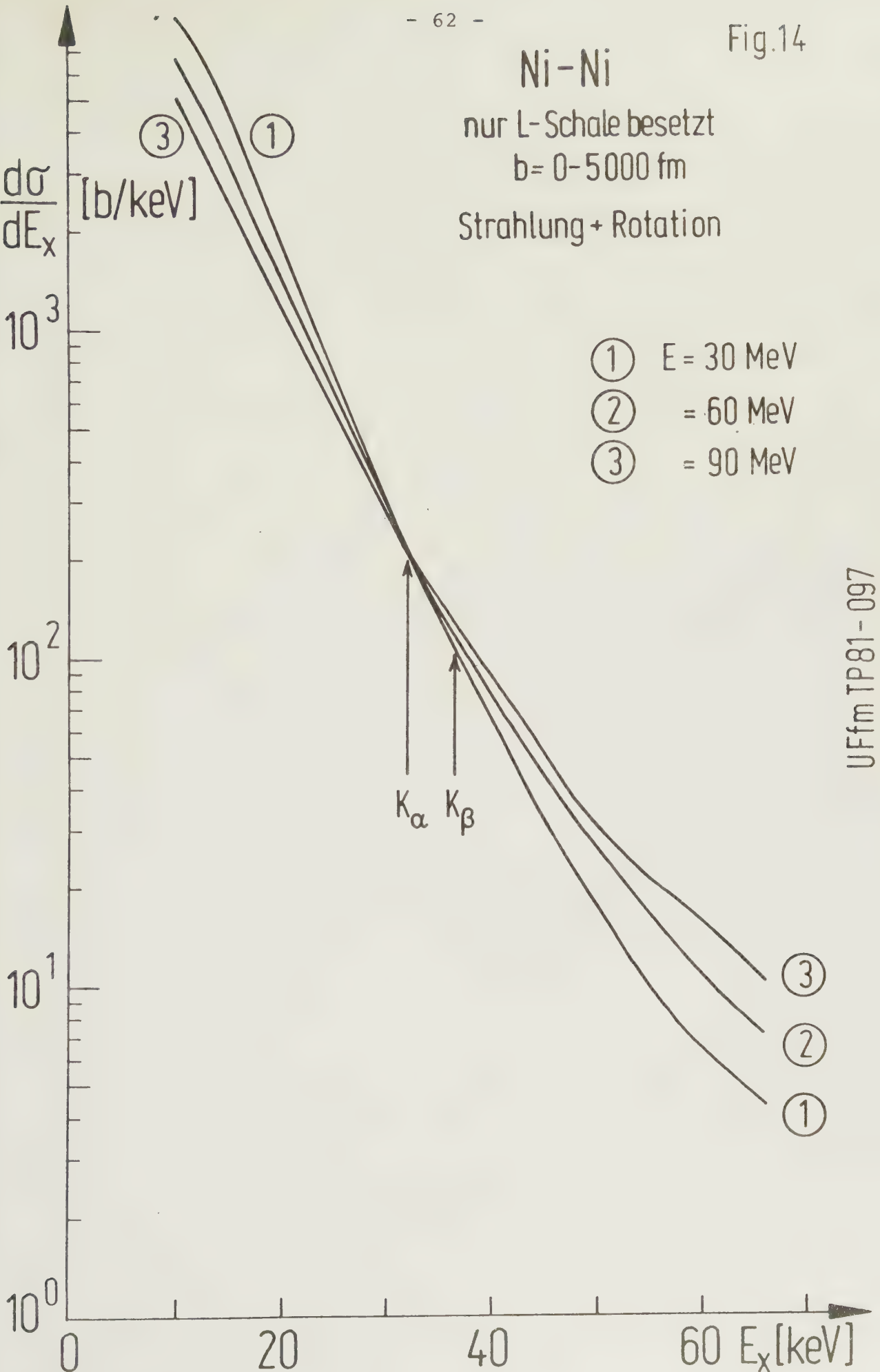
①

20

40

60

$E_x$  [keV]



Die in Figur 14 gezeigte Abhängigkeit der Spektren von der Einschußenergie stimmt mit dem Experiment darin überein, daß für größere Laborenergien der exponentielle Abfall der Spektren flacher wird.

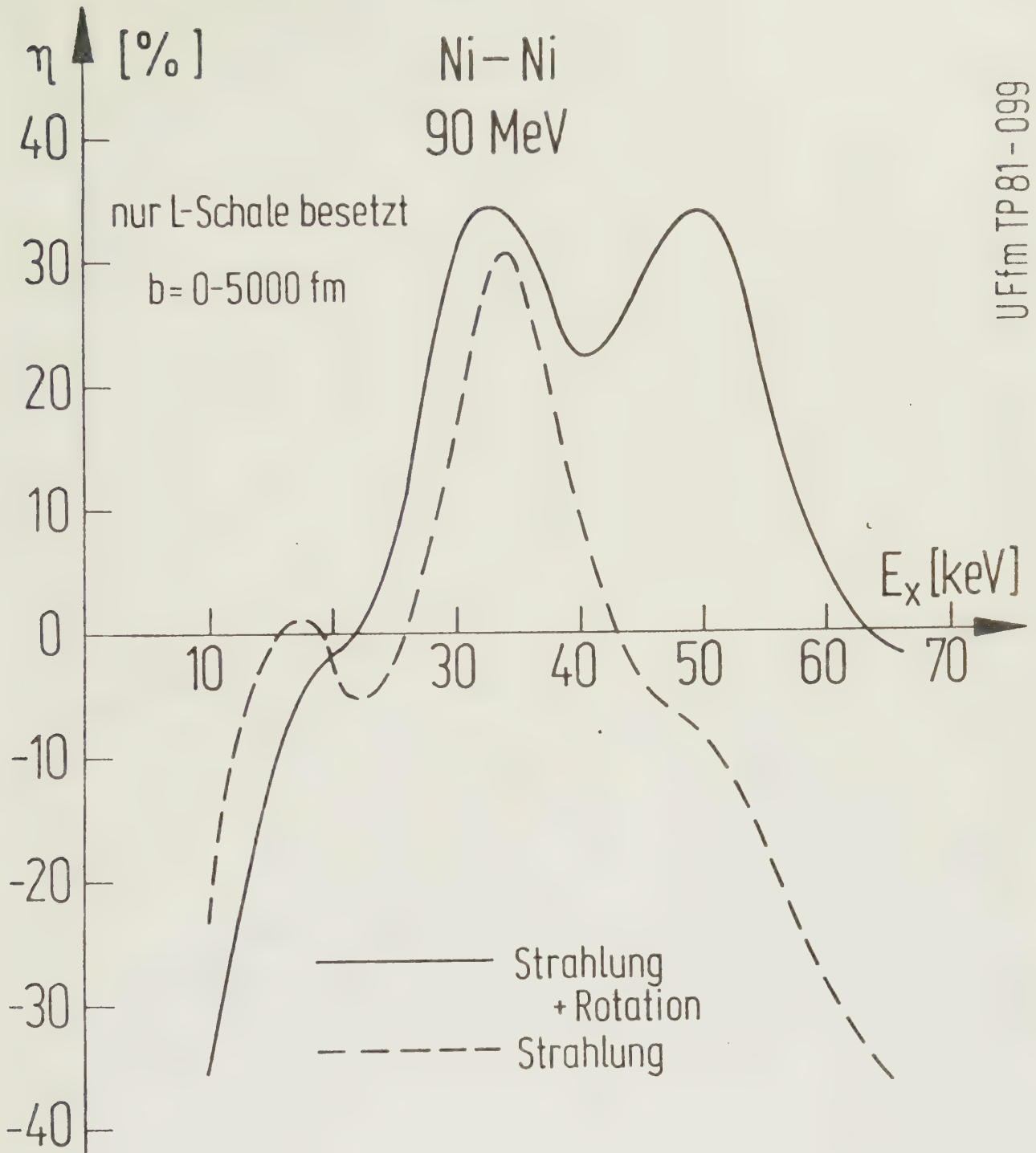
Für die Anisotropie zeigt Figur 15, daß unabhängig von der Mitnahme der Rotationskopplung die Struktur und Größe nicht mit dem Experiment übereinstimmt wie es auch schon bei den Rechnungen für das Pb - Pb - System der Fall war (13,33).

Figur 16 zeigt noch einmal den direkten Vergleich von Theorie und Experiment. Die Abhängigkeit der Anisotropie von der Laborenergie ist in Figur 17 dargestellt. Es konnte nicht bestimmt werden, wodurch die Oszillationsstruktur auftritt. Der Vergleich mit dem Experiment (s. Figur 1 b) zeigt, daß die berechneten Anisotropien in allen Fällen kleiner als die gemessenen sind.

Figur 14:

Abhängigkeit des Ni - Ni - Spektrums von der Laborenergie. In allen drei Fällen wurde mit eingeschalteter Rotationskopplung gerechnet.

$K_\alpha$  - und  $K_\beta$  - Energie des vereinigten Systems sind durch Pfeile markiert.



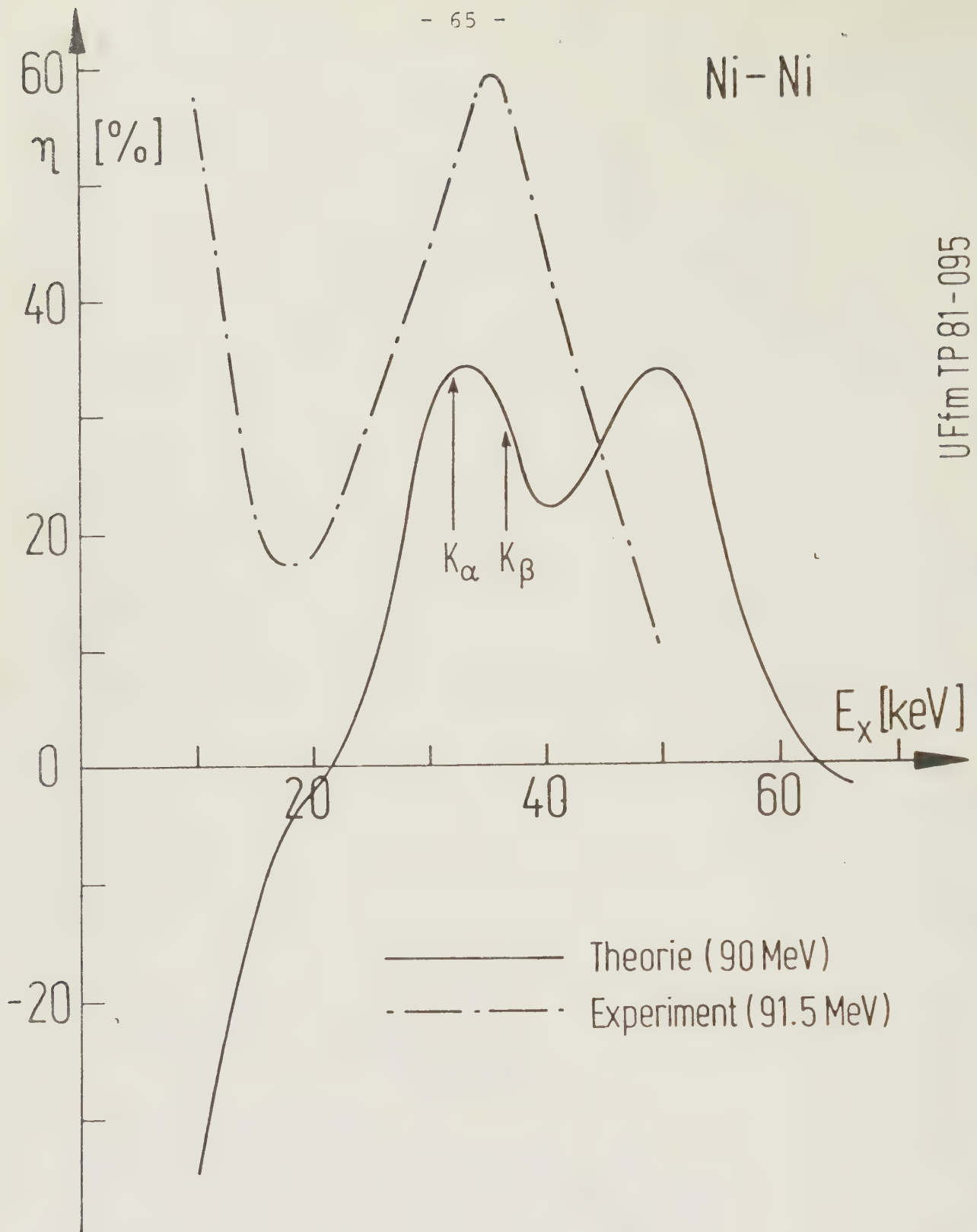
UFFm TP 81-099

Figur 15:

Vergleich der Rechnung für die Anisotropie bei eingeschalteter (—) und bei abgeschalteter (---) Rotationskopplung. Laborenergie = 90 MeV.

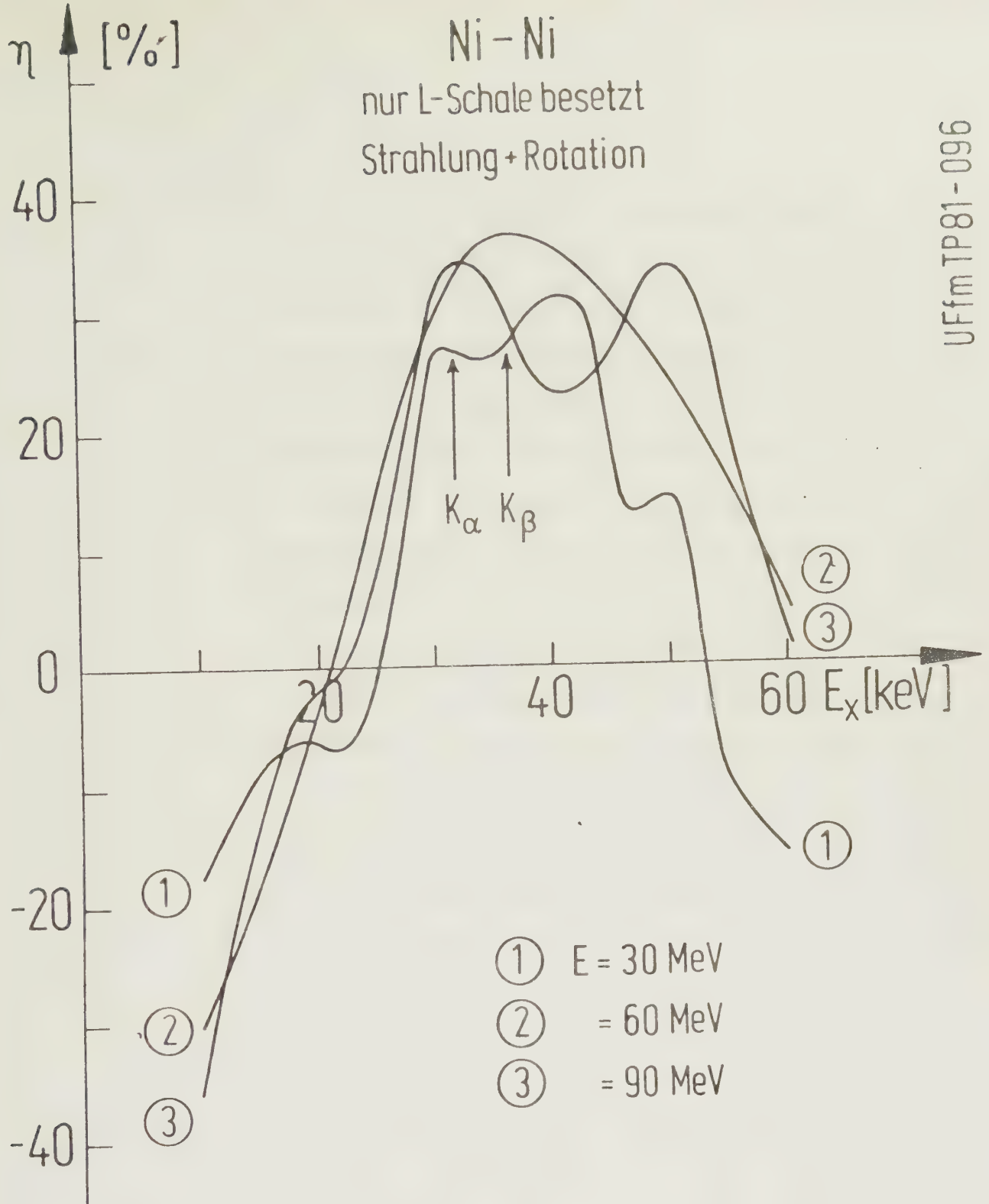
Ni-Ni

UFFm TP 81-095



Figur 16:

Vergleich der berechneten Anisotropie mit eingeschalteter Rotationskopplung bei 90 MeV (—) mit der von Greenberg et al. gemessenen Anisotropie bei 91.5 MeV (- · - · -).



Figur 17:

Vergleich der berechneten Anisotropien für drei verschiedene Labornergien bei eingeschalteter Rotationskopplung. Die  $K_\alpha$ - und  $K_\beta$ -Energie des vereinigten Systems sind durch Pfeile markiert.

#### VIII. Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde die K - MO - Röntgenstrahlung für das System Ni - Ni berechnet. Wesentliche Voraussetzungen waren die semi-klassische Näherung, die Annahme der Adiabasie, die Vernachlässigung der Elektron - Elektron - Wechselwirkung und der Grenzfall langer Wellenlängen. Es hat sich gezeigt, daß die radialen Kopplungsmatrixelemente in der vorliegenden Form keine richtigen Werte für die Ionisationswahrscheinlichkeiten liefern und daher vernachlässigt werden mußten. Daher wäre eine wesentliche Verbesserung die Verwendung geeigneter Matrixelemente bei denen die Translation berücksichtigt wird. Dazu müßten allerdings die Zweizentrenenergien auch für wesentlich größere Kernabstände berechnet werden. Die jetzige Vernachlässigung der radialen Kopplung dürfte der Grund dafür sein, daß der exponentielle Abfall der Spektren gegenüber den gemessenen Spektren zu klein ist. Für den nicht befriedigenden Verlauf der Anisotropie dürfte der Grenzfall langer Wellenlängen verantwortlich sein. An einem Programm, das ohne diese Näherung auskommt, arbeitet zur Zeit J. Kirsch (36).

Eine weitere Verbesserung in Richtung eines realistischen Modells wäre die Einbeziehung von Kontinuumszuständen. Dagegen scheint es numerisch äußerst aufwendig zu sein, einen vollständigen Doppelstoßprozeß zu berechnen. Dazu wäre eine Integration über die Stoßparameter nach dem ersten Stoß erforderlich, um die richtigen Ionisationswahrscheinlichkeiten zu erhalten. Eine Näherung dafür hat H. Schmidt-Böcking entwickelt <sup>(37)</sup>. Insgesamt zeigt sich, daß die mit Verbesserungen verbundenen Schwierigkeiten nur numerischer Natur sind.

Literaturverzeichnis

1. J. Rafelski, L. Fulcher, W. Greiner  
Phys. Rev. Lett. 27 (1971) 958
2. F. W. Saris, W. F. van der Weg, H. Tawara, R.  
Laubert  
Phys. Rev. Lett. 28 (1972) 717
3. W. Meyerhof, T. K. Saylor, S. M. Lazarus, W. A.  
Little, B. B. Triplett, L. F. Chase, R. Anholt  
Phys. Rev. Lett. 32 (1973) 1279
4. C. K. Davis, J. S. Greenberg  
Phys. Rev. Lett. 32 (1974) 1215
5. P. Gippner, K.-H. Kaun, F. Stary, W. Schulze,  
Yu. P. Tretyakow  
Nucl. Phys. A230 (1974) 509
6. P. Vincent  
ph D Thesis, Yale University 1976
7. J. S. Greenberg, C. K. Davis, P. Vincent  
Phys. Rev. Lett. 33 (1974) 473
8. B. Müller, W. Greiner  
Phys. Rev. Lett. 33 (1974) 469
9. G. Kraft, P. H. Mokler, H. J. Stein  
Phys. Rev. Lett. 33 (1974) 476
10. Ch. Stoller, W. Wölfli, G. Bonani, M. Stöckli,  
M. Suter  
J. Phys. B10 (1977) 1347
11. J. Kirsch, B. Müller, W. Greiner  
Z. Naturforsch. 35a (1980) 579

12. J. M. Eisenberg, W. Greiner  
Excitation Mechanisms of the Nucleus  
Amsterdam 1976
13. J. Kirsch  
Dissertation, Frankfurt am Main 1980
14. Für das Überlassen der Figur 3 sei Herrn Dr.  
J. Kirsch herzlich gedankt.
15. K. H. Wietschorke  
Diplomarbeit, Frankfurt am Main 1980
16. W. Betz  
Dissertation, Frankfurt am Main 1980
17. B. Müller  
Dissertation, Frankfurt am Main 1973
18. B. Müller, J. Rafelski, W. Greiner  
Phys. Lett. B47 (1973) 5
19. B. Müller, W. Greiner  
Z. Naturforsch. A31 (1976) 1
20. J. Rafelski, B. Müller  
Phys. Rev. Lett. 36 (1976) 517
21. J. Reinhardt, B. Müller, W. Greiner, G. Soff  
Phys. Rev. Lett. 43 (1979) 1307
22. E. R. Davisson  
Physical Chemistry, New York 1969
23. U. Heinz  
Dissertation, Frankfurt am Main 1980
24. D. R. Bates, R. MacCarroll  
Proc. Roy. Soc. A245 (1958) 175

25. U. Heinz, W. Greiner, B. Müller  
Phys. Rev. A23 (1981) 562
26. W. Betz, G. Soff, B. Müller, W. Greiner  
Phys. Rev. Lett. 37 (1976) 1046
27. A. R. Edmonds  
Drehimpulse in der Quantenmechanik, Mannheim 1964
28. W. Betz  
Diplomarbeit, Frankfurt am Main 1976
29. G. Soff, W. Greiner, W. Betz, B. Müller  
Phys. Rev. A20 (1979) 169
30. M. E. Rose  
Elementary Theory of Angular momentum, New York 1957
31. K. Bethge, G. Gaukler, W. Lichtenberg, G. Nolte,  
H. Schmidt-Böcking, R. Schuch, H. J. Specht, K.  
Stiebing, I. Tserruya  
Inst. f. Kernphysik Jahresbericht, Frankfurt a.M. 1978
32. R. Anholt, W. F. Meyerhof  
Phys. Rev. A16 (1977) 257
33. J. Kirsch, W. Betz, J. Reinhardt, G. Soff, B.  
Müller, W. Greiner  
Phys. Lett. 72B (1978) 298
34. J. S. Briggs, J. Macek  
J. Phys. B5 (1972) 579
35. R. Anholt  
Z. Phys. A288 (1978) 257
36. J. Kirsch, private Mitteilung
37. H. Schmidt-Böcking, private Mitteilung

## Figurenverzeichnis

Fig

|        |                                                                       |       |
|--------|-----------------------------------------------------------------------|-------|
| 1      | Spektren und Anisotropien für verschiedene Laborenergien (Experiment) | 2     |
| 2      | Skalierungsverhalten der Anisotropie                                  | 4     |
| 3      | Koordinatensysteme                                                    | 14    |
| 4      | Ni - Ni - Korrelationsdiagramm                                        | 20    |
| 5      | Verbotene Kreuzungen der $\Sigma$ - Zustände                          | 25    |
| 6 a-b  | Rotationsmatrixelemente zum $1\Sigma_g$ -Zustand                      | 36/37 |
| 7 a-c  | Dipolmatrixelemente zum $1\Sigma_g$ -Zustand                          | 39/41 |
| 8      | $1\Sigma_g$ -Ionisation für 2 Abschneideparameter                     | 45    |
| 9      | Stoßparameterabhängigkeit reiner Strahlungsspektren                   | 47    |
| 10     | Laborenergieabhängigkeit reiner Strahlungsspektren                    | 49    |
| 11 a-c | Beiträge einzelner Zustände zum Strahlungsspektrum                    | 51/53 |
| 12 a-d | Stoßparameterabhängigkeit der differentiellen Querschnitte            | 56/59 |
| 13     | Wirkungsquerschnitt für 90 MeV                                        | 61    |
| 14     | Wirkungsquerschnitte für verschiedene Laborenergien                   | 62    |
| 15     | Anisotropie mit und ohne Rotationskoppl.                              | 64    |
| 16     | Anisotropie (Vergleich Theorie-Exp.)                                  | 65    |
| 17     | Anisotropien bei verschiedenen Laborenergien                          | 66    |

## Lebenslauf

Am 3. Januar 1951 wurde ich als Sohn des damaligen Regierungsrats Heinrich Peitz und seiner Ehefrau Margret in Düsseldorf geboren. Von 1957 bis 1961 besuchte ich die Grundschule, zuerst in Düsseldorf, dann in Berlin und Frankfurt. Anschließend ging ich von 1961 bis 1968 auf das Wöhlergymnasium. 1968 begann ich das Studium der Physik und Mathematik an der J.W. Goethe-Universität in Frankfurt a.M. . 1970 legte ich die Diplom-Vorprüfung in Mathematik ab. 1977 erhielt ich in der Diplom-Hauptprüfung Physik und für die Diplomarbeit die Note "sehr gut". Seitdem bin ich am Institut für Theoretische Physik als Doktorand tätig.

Meine akademischen Lehrer waren:

Prof. Dr. Burde, Prof. Dr. H. Dänzer, Prof. Dr. P. Dembowski, Prof. Dr. H. Dinges, Dr. A. Doiwa, Prof. Dr. R. Dreizler, Prof. Dr. W. Franz, Prof. Dr. U. Gerhardt, Prof. Dr. W. Greiner, Prof. Dr. G. Köthe, Prof. Dr. W. Martienssen, Prof. Dr. H. Müser, Prof. Dr. M. Reichert, Prof. Dr. W. Scheid, Prof. Dr. E. Schopper, Prof. Dr. F. Stummel

## Danksagung

Meinem verehrten Lehrer, Herrn Prof. Dr. W. Greiner, gilt mein Dank für die Anregung zu dieser Arbeit und für das Interesse, mit dem er sie begleitet hat.

Bei den Herren Prof. Dr. B. Müller und Dr. J. Kirsch möchte ich mich besonders für viele wertvolle Diskussionen herzlich bedanken.

Außerdem danke ich den Herren Dr. J. Kirsch und Dr. W. Betz für die Überlassung von Computerprogrammen.

Mein Dank für Hilfe bei numerischen Problemen gilt besonders den Herren K.-H. Ziegenhain und G. Gräbner. Ferner danke ich all jenen hier nicht namentlich aufgeführten Kollegen, die mich mit Rat und Tat unterstützt haben.

Weiterhin gilt mein Dank Frau Utschig für die sorgfältige Ausführung der Zeichnungen und Herrn Brose für den ebenso sorgfältigen Druck der Arbeit.

Die benötigte Rechenzeit wurde von der Gesellschaft für Schwerionenforschung (GSI) in Darmstadt zur Verfügung gestellt.

Frankfurt am Main, März 1981

Heinrich Peitz









